

00382
524

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

**Uso del Efecto Doppler en el
Estudio de la Colisión $\text{Na}_2 + \text{Ar}$
a 0.3 eV**

T E S I S

**QUE PRESENTA EL M. EN C.
ALEJANDRO MORALES MORI
PARA OPTAR POR EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)**

MEXICO, D. F.

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

1987



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

I N D I C E

Agradecimientos	
Antecedentes	
Introducción	1
CAP. I El uso del efecto Doppler en la espectroscopía molecular	4
1.1 Distribuciones de velocidad por corrimiento Doppler (DVCD)	5
1.2 Distribuciones angulares por corrimiento Doppler (DACD)	12
1.3 Saturación de la fluorescencia	15
CAP. II El espectro molecular del Sodio	29
2.1 Producción de un haz molecular por la expansión supersónica de un gas	29
2.2 Medida de las temperaturas traslacional, vibracional y rotacional	33
2.3 Espectro rotacional Na_2 , $A' \Sigma_u^+ \leftarrow X' \Sigma_g^+$	38
CAP. III Dispositivo experimental	60
3.1 Cámara de Colisiones y sistema de bombeo	60
3.2 Fuentes de expansión supersónica de Na_2 y Ar	63
3.3 Láser analizador y láser bomba	66
3.4 Sistema de recolección óptica	68
3.5 Interferómetro	69
3.6 Sistema CAMAC de adquisición de datos	69
CAP. IV Medida de la sección transversal en la colisión:	71
$\text{Na}_2 X_{\Sigma} (v''=0, J_i=7) + \text{Ar} \rightarrow \text{Na}_2 X_{\Sigma} (v''=0, J_f) + \text{Ar}$	
4.1 Método para la medida de la sección relativa	71
4.2 Obtención y manejo de los datos experimentales	77
4.3 Discusión de los resultados	78
Conclusiones	81
Referencias bibliográficas	82

ANTECEDENTES

Desde los inicios del laboratorio de colisiones atómicas y moleculares del Instituto de Física de la UNAM., se reconoció la necesidad de incorporar a las herramientas experimentales, las técnicas de excitación con láser y detección de la fluorescencia inducida.

En los experimentos de colisiones entre átomos la energía interna del proyectil y el blanco, juega un papel importante en el resultado de la colisión.

Para moléculas, las energías vibracional y rotacional son también variables importantes del proceso. Por lo antes dicho, se consideró conveniente instalar un laboratorio de espectroscopía láser que permitiera profundizar en el estudio de los mecanismos de las colisiones. El láser es un instrumento adecuado para ese propósito porque es capaz de excitar selectivamente a las partículas bajo estudio; también puede preparar el estado antes de la colisión despoblando cierto nivel, e incluso medir la población de estados después de la colisión. Por supuesto, esos son sólo algunos ejemplos del uso del láser en la investigación ya que el campo de aplicabilidad es realmente muy amplio.

Mi participación en el proyecto se inició con una estancia en el M.I.T. en Cambridge, Mass. con el grupo que dirige el Prof. D.E. Pritchard.

Ese grupo tiene una amplia experiencia en el campo de la espectroscopía con láseres, de tal forma que mi colaboración con ellos fué para mí una experiencia muy valiosa, parte de la cual esta descrita en esta tesis.

Posteriormente, se iniciaron los trabajos para la instalación de un laboratorio en el Instituto de Física, con capacidad para hacer espectroscopía de alta resolución.

Junto con C. Cisneros e I. Alvarez se proyectó un laboratorio con esas características, y finalmente su instalación se realizó en el laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares del IFUNAM, en la ciudad de Cuernavaca, Mor.

Espero que este trabajo contribuya, aunque sea en pequeña medida, a difundir algunas de las técnicas de la espectroscopía láser, tanto entre los miembros de nuestro grupo de trabajo como en otras personas interesadas en el tema.

INTRODUCCION

Además de la energía de translación y de la energía electrónica, una molécula diatómica tiene a las energías vibracional y rotacional, como grados de libertad adicionales.

Cuando se efectúa una colisión de una molécula de este tipo con un átomo, son de esperarse cambios o transferencias entre las energías que corresponden a los diferentes grados de libertad antes mencionados.

Esta tesis es un estudio experimental de la colisión a 0.3 eV, entre la molécula de sodio Na_2 y el átomo de argón. El propósito de este estudio es conocer la probabilidad o sección transversal asociada al cambio de la energía rotacional; así como la distribución angular de la molécula después de la colisión.

Para lograr el propósito antes mencionado, es necesario conocer cuantas moléculas pasan, como consecuencia de la colisión, del número cuántico J_i al J_f . En donde J_i y J_f son los números cuánticos rotacionales, inicial y final respectivamente.

La técnica utilizada fue la de despoblar el nivel J_i y medir el efecto en la población de J_f ; de este dato se puede calcular el número de transferencias de J_i a J_f .

Puesto que la molécula Na_2 es homonuclear, no posee un momento dipolar permanente y por lo tanto no se pueden excitar con la radiación los niveles rotacionales o vibracionales

de un mismo estado electrónico. Esto significa que para despo-
blar el nivel J_1 es necesario hacerlo a través de una excita-
ción electrónica; la cual se logra con el uso de los láseres
de tinte, que son capaces de excitar a la molécula de sodio
del nivel X al A, con la selección del nivel rotacional.

La fluorescencia inducida por el láser, que se produce
después de la excitación electrónica, es la medida de la po-
blación del estado. Pero para que la fluorescencia sea repre-
sentativa de la población, es necesario considerar que la ex-
citación con láser satura la transición. Es por ello, que en
este trabajo se analiza con detalle el fenómeno de saturación.

Por otra parte, la producción de un haz molecular de so-
dio por efusión de éste, desde un horno a la temperatura de
varios centenares de grados Celsius; tendría tal cantidad de
estados vibracionales y rotacionales poblados que no sería po-
sible manejar la situación experimentalmente. Por ello es ne-
cesario "enfriar" a las moléculas.

La técnica del chorro de expansión libre en un gas iner-
te, en el que se ha "sembrado" el sodio, permite lograr el
enfriamiento deseado. Este tipo de fuente molecular fué utili-
zada en el experimento, tanto para la producción del sodio co-
mo para la del argón.

Los dos haces (Na_2 y Ar), se cruzan en la región donde
ocurre la colisión; en esta zona, un láser de tinte analiza
la población rotacional después de la colisión. Otro láser
de tinte, que interacciona con el haz de Na_2 antes de la co-

lisión, despuebla selectivamente, el nivel rotacional inicial de interés.

Un fotomultiplicador enfriado, registra la fluorescencia por medio de la técnica de cuenta de fotones.

Un punto sobresaliente y distintivo de este experimento, es que la determinación de la distribución de velocidades antes de la colisión, se realiza midiendo el corrimiento Doppler que se produce por el movimiento relativo de las moléculas con el láser, así como por el ángulo con este último. Como el corrimiento Doppler es también función del ángulo, es posible estudiar distribuciones angulares sin la necesidad de detectores móviles.

Adicionalmente, se construyó un interferómetro tipo Michelson-Sagnac, capaz de medir la longitud de onda con una precisión de una parte en 10^6 , con el fin de determinar los niveles moleculares. El procedimiento utilizado fué el de comparar la longitud de onda del láser de tinte contra la de un láser de He-Ne estabilizado. Usando esta técnica, se obtuvo un espectro en el que se identifican los niveles rotacionales.

Para concluir este trabajo, se muestran los resultados obtenidos para las secciones transversales relativas, correspondientes a diferentes transferencias de energía rotacional; y se hace una discusión entre estos resultados y los propuestos por diferentes teorías.

CAP. I EL USO DEL EFECTO DOPPLER EN LA ESPECTROSCOPIA MOLECULAR.

Los experimentos típicos con haces moleculares o atómicos, normalmente incluyen la obtención de distribuciones en energía o ángulo, con el fin de obtener secciones transversales.

Para las distribuciones en energía, cuando se trata de partículas cargadas, es usual utilizar espectrómetros electrostáticos o magnéticos; las distribuciones angulares se obtienen por medio de un detector móvil, o un conjunto de éstos.

El efecto Doppler permite obtener distribuciones angulares⁽¹⁾ o de velocidad de una manera completamente distinta, ya que la medida de estas variables se logra por la detección de la fluorescencia inducida por un láser y no de la partícula misma. Sin embargo, es indispensable que el sistema bajo estudio presente fluorescencia; requiriéndose además, el uso de láseres de tinte entonables que tienen anchos espectrales notablemente angostos.

En lo que sigue se explica con detalle esta técnica para los casos de: Distribuciones de Angulares por Corrimiento Doppler (DACD) y Distribuciones de Velocidad por Corrimiento Doppler (DVCD).

I.1 DISTRIBUCIONES DE VELOCIDAD POR CORRIMIENTO DOPPLER (DVCD)

La frecuencia ν de absorción de un sistema (átomo o molécula) que se mueve a una velocidad v y a un ángulo θ , (fig. I.1) con respecto a un rayo de luz emitido por una fuente en reposo es (2):

$$\nu = \frac{\nu_0}{\gamma(1 + \beta \cos \theta)}, \quad \gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}, \quad \beta = \frac{v}{c} \quad (1.1)$$

ν_0 es la frecuencia de absorción para el sistema en reposo y c es la velocidad de la luz.

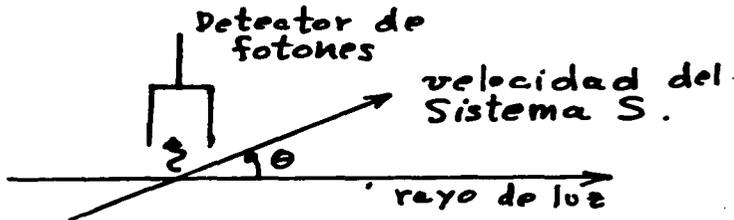


Fig. I.1 Ángulo entre el haz molecular y el láser.

Un desarrollo para ν da:

$$\nu = \nu_0 \left(1 - \beta \cos \theta + \beta^2 \left(\cos^2 \theta - \frac{1}{2}\right) + \dots\right) \quad (1.2)$$

De esta expresión se obtienen efectos de primero y segundo orden. El efecto a segundo orden en β , se conoce como

efecto Doppler transverso o relativista, y se le da esa denominación porque aparece aun en el caso en que $\theta = 90^\circ$, siendo que para un caso no relativista, a ese ángulo, no hay efecto Doppler.

Para los fines de este trabajo es conveniente calcular el valor de $\beta = \frac{v}{c}$ en función del voltaje V o de la temperatura T . En el primer caso V es el voltaje de aceleración de un sistema con carga Ze y en el segundo la temperatura del horno o fuente de donde procede el sistema bajo estudio.

$$\beta \approx 4.6 \times 10^5 \left(\frac{ZeV}{M} \right)^{1/2}, \quad (1.3)$$

$$\beta \approx 5.2 \times 10^{-7} \left(\frac{T}{M} \right)^{1/2} \quad (1.4)$$

M es la masa en u.a.m.,
 V se da en volts y T en $^\circ K$.

Si se considera que la resolución para la espectroscopía con láseres de tinte puede llegar a ser de una parte en 10^4 , de las fórmulas (1.2), (1.3) y (1.4) se concluye:

- El efecto de primero orden puede llegar a ser importante desde voltajes de aceleración de una fracción de milivolts, o desde temperaturas de $1^\circ K$.
- El efecto relativista o de segundo orden, puede llegar a ser importante desde voltajes de aceleración de 100 volts o desde temperaturas de $1 \times 10^6 \text{ }^\circ K$.

Los valores de Ze y M , determinan finalmente la importancia de esos efectos.

Como se verá posteriormente, el experimento descrito en este trabajo, se realizó a una temperatura de 1000°K y sin aceleración eléctrica, por lo que se usará:

$$v = v_0(1 - \beta \cos \theta), \quad \frac{v - v_0}{v_0} = \frac{\Delta v}{v_0} = \beta \cos \theta. \quad (1.5)$$

Si el sistema S en reposo, se excita a la frecuencia v_0 , para excitarlo cuando está en movimiento será necesario cambiar la frecuencia por Δv según la expresión (1.5). A un ángulo θ fijo, la presencia de fluorescencia en el detector D implica que el sistema se ha excitado y después, ha caído por fluorescencia, así que la velocidad de S es:

$$v = \frac{c}{\cos \theta} \frac{\Delta v}{v_0}, \quad (1.6)$$

por lo tanto, a un "barrido" en v corresponde un "barrido" en v . Si la eficiencia total Q , del detector D es $Q = 1$, la sección transversal de excitación de S es v ; el número de fotones fluorescentes detectados por unidad de tiempo en D: es R, se tiene:

$$R = \frac{v \text{ Vol. } I_f I_s Q}{v}, \quad (1.7)$$

en donde Vol. es el volumen de la zona de interacción entre el haz de luz y el haz formado por las partículas a las que se les ha llamado sistema. I_f es el número de fotones que inciden por unidad de área y tiempo, I_s es el número de sistemas que inciden por unidad de área y tiempo.

De 1.7 :

$$I_s = \frac{R v}{v \text{ Vol. } I_f Q}, \quad (1.8)$$

que junto con (1.6) da:

$$I_s = \frac{c R \Delta \nu}{v \nu_0 \text{Vol. } I_0 Q \cos \theta} \quad , \quad (1.9)$$

lo cual significa que $R \Delta \nu$ es proporcional al número de sistemas que se mueven a la velocidad v : (posteriormente al explicar el fenómeno de saturación de la fluorescencia se afinarán estos conceptos).

Si se grafica $R \Delta \nu$ vs. $\Delta \nu$ se obtendrá por lo tanto, una gráfica de la distribución de velocidades. Esto es la esencia del método DVCD.

En la práctica, un haz de partículas se encuentra dentro de una cámara de vacío por lo que normalmente no es fácil determinar la frecuencia ν_0 de absorción en reposo. Un sencillo arreglo permite resolver este problema, (Fig. 1.2)

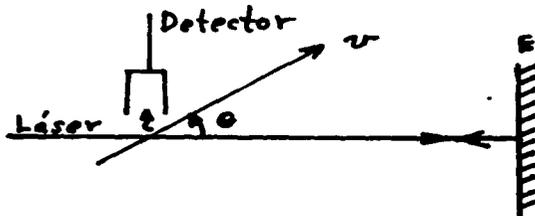


Fig. 1.2 Uso de dos haces propagándose en sentido contrario.

El espejo E refleja colinealmente el rayo de luz y por tanto para una velocidad ν hay dos $\Delta \nu$ que producirían fluorescencia:

$$v_1 - v_0 = v_0 \beta \cos \theta, \quad v_2 - v_0 = -v_0 \beta \cos \theta$$

entonces:

$$(v_1 - v_0) - (v_2 - v_0) = v_1 - v_2 = 2v_0 \beta \cos \theta. \quad (1.10)$$

También: $v_0 = \frac{v_1 + v_2}{2}$, sustituyendo, en 1.10:

$$v = \frac{c}{\cos \theta} \frac{v_1 - v_2}{v_1 + v_2}$$

Si se supone una distribución en velocidades con la forma de una función delta, la gráfica tendría el aspecto que se muestra en la fig. 1.3.

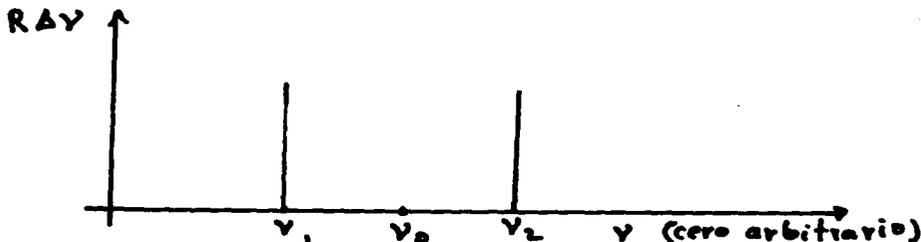


Fig. 1.3. Distribución de la fluorescencia para dos haces luminosos viajando en sentido contrario.

En esta figura se ilustra como un "barrido" en v con $\Delta v = v - v_0$ arroja todos los datos necesarios: velocidad del haz y la distribución de la velocidad.

La descripción que previamente se ha hecho del método DVCD contiene algunas simplificaciones que en la práctica pueden estar lejos de la realidad.

Por supuesto, la falta de paralelismo en los haces conduce a un intervalo para los valores de θ , lo que a su vez ensancharía las distribuciones delta mostradas en la fig. 1.3, lo anterior, independientemente de la distribución de velocidades del haz.

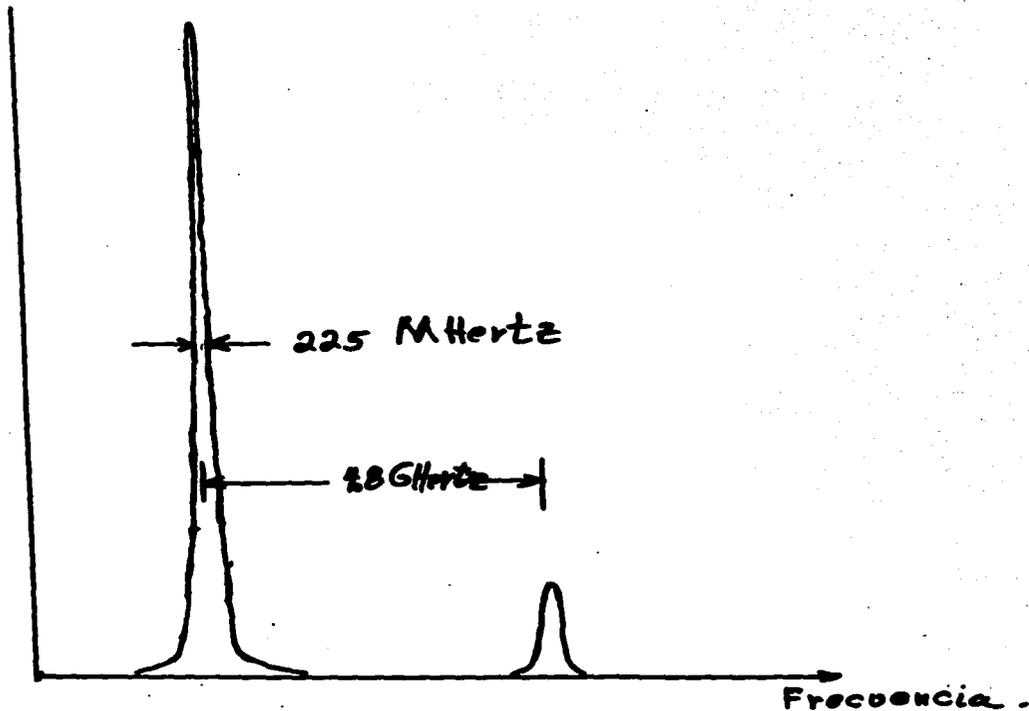
En la fig. 1.4 se muestra el aspecto experimental de velocidades para un haz de sodio molecular producido por la técnica de chorro de expansión libre, (que se describirá posteriormente). Las dos contribuciones que se observan corresponden a los haces colineales antes mencionados.

El procedimiento que se siguió para obtener esas distribuciones, fué el de cruzar el haz molecular con el láser entonable y recolectar la fluorescencia. En un capítulo posterior se describirá la forma en que realiza un barrido en frecuencia con el láser entonable.

La separación entre los dos picos fue de 4.8 G Hertz, el valor de $\nu_1 + \nu_2$ fue de 32874 cm^{-1} lo que da un valor de $\nu_0 = 164437 \text{ cm}^{-1} \rightarrow 4.93 \times 10^{14} \text{ Hertz}$, ya que $\theta = 20^\circ$ (posteriormente se explicará la razón de elegir este ángulo) tenemos:

$$v = \frac{c(\nu_1 - \nu_2)}{2\nu_0 \cos \theta} = 1.55 \times 10^5 \text{ cm/seg}$$

Número de cuentas u.a.



Fluorescencia del haz de Na₂ vs.
la frecuencia del láser sintonizable.

Fig. 1-4

Esta es la velocidad media del haz molecular.

También puede verse de la misma figura que el ancho de la distribución de velocidades corresponde a un corrimiento Doppler de 225 M Hertz, o sea una semianchura en la distribución de velocidades de 7.3×10^3 cm/seg.

Este resultado experimental muestra claramente la utilidad de la técnica DVCD.

1.2 DISTRIBUCIONES ANGULARES POR CORRIMIENTO DOPPLER (DACD)

La fig. 1.5: es un diagrama de Newton para la colisión $\text{Na}_2 + \text{Ar}$:

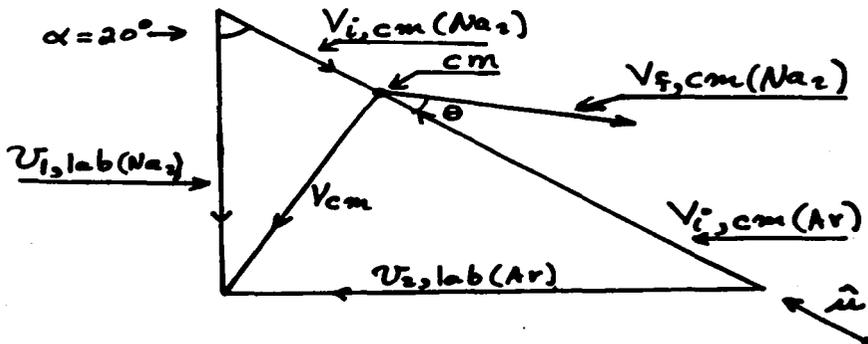


Fig. 1.5 Diagrama de Newton que relaciona las velocidades en centro de masa y laboratorio.

Este diagrama ilustra la colisión de dos haces perpendiculares entre sí.

Los dos catetos del triángulo representan la colisión en el laboratorio, mientras que la hipotenusa es la colisión vista desde el centro de masa. La construcción de este diagrama se basa en la relación que existe entre los vectores de la velocidad en centro de masa y laboratorio:

$$\underline{V}_{cm} = \frac{m_1 \underline{v}_1 + m_2 \underline{v}_2}{m_1 + m_2}, \quad \underline{v}_1 = \underline{v}_{1,cm}(Na_2) + \underline{V}_{cm}.$$

La utilidad de este diagrama consiste en que muestra las características de la colisión tanto en centro de masa como en el sistema del laboratorio.

Si se envía, como se indica en la figura, un haz de luz en la dirección en que se mueven las partículas, vistas desde el centro de masa; el corrimiento Doppler para la molécula de sodio dispersada a un ángulo θ y a una velocidad

$\underline{v}_{f,cm}(Na_2)$ es:

$$\Delta \gamma = (\underline{V}_{cm} + \underline{v}_{f,cm}(Na_2)) \cdot \frac{v_0}{c} \hat{\mu}$$

en donde $\hat{\mu}$ es un vector unitario en la dirección del haz de luz.

La fórmula anterior conviene expresarla de la siguiente forma:

$$\Delta \gamma = \frac{v_0}{c} \underline{V}_{cm} \cdot \hat{\mu} + \frac{v_0}{c} v_{f,cm}(Na_2) \cos \theta. \quad (1.12)$$

Es fácil identificar el primer término, como el corrimiento Doppler debido a la velocidad del centro de masa de las partículas de la colisión. El segundo término corresponde a un corrimiento Doppler, pero relativo al centro de masa.

Como puede notarse, el haber hecho coincidir la dirección de la luz con la dirección del movimiento de las partículas desde el centro de masa, permite evaluar los datos de la colisión en centro de masa.

Para lograr esta coincidencia primero se miden las velocidades antes de la colisión por el método DVCD y de ahí se calcula el ángulo al que debe apuntarse el láser.

Por supuesto, además de lo anterior el láser debe estar dirigido hacia la zona de colisión que es en donde se cruzan los haces. (en el sistema de laboratorio).

Puesto que la velocidad del haz de Argón fue de 5.6×10^4 cm/seg (medida con DVCD) y la del haz de sodio molecular fue de 1.55×10^5 cm/seg. El ángulo que debe hacer el láser con el haz de sodio es de 20° . (esto explica la elección de este ángulo para DVCD).

Como el Argón no se puede excitar con el láser de tinte, se introdujo Br_2 como impureza que viajará a la misma velocidad del Argón para utilizar la técnica DVCD.

Finalmente, si $V_{f,cm}(Na_2)$ es constante, un barrido en la frecuencia del láser con la correspondiente detección de la fluorescencia, es en realidad la medida de una distribución angular, ya que de la for. 1.12 se obtiene

$$\cos \theta = \left(\Delta Y - \frac{Y_0}{C} V_{cm} \hat{u} \right) / \frac{Y_0}{C} V_{f,cm}(Na_2). \quad (1.13)$$

Esta última expresión es la relación básica para el método DACD.

1.3 SATURACION DE LA FLUORESCENCIA

Como se mencionó en las páginas anteriores, la recolección de la fluorescencia es esencial para los métodos descritos. Por esto es importante tener un método de cálculo que permita cuantificar la magnitud de la fluorescencia esperada y además reconocer la saturación.

Por otra parte, es conveniente mencionar que el advenimiento de los láseres de tinte entonables, abrió la posibilidad de realizar los experimentos con efecto Doppler que se mencionaron. La espectroscopía tradicional también ha recibido un impulso importante ya que la producción de radiación electromagnética con ancho espectral de ~ 1 M Hertz e incluso menor (en la región visible), hace posible excitar selectivamente niveles moleculares rotacionales a través de una excitación electrónica.

En la fig. 1.6 que ilustra este hecho, se muestran algunos niveles rotacionales asociados a dos niveles electrónicos de una molécula en niveles vibracionales arbitrarios.

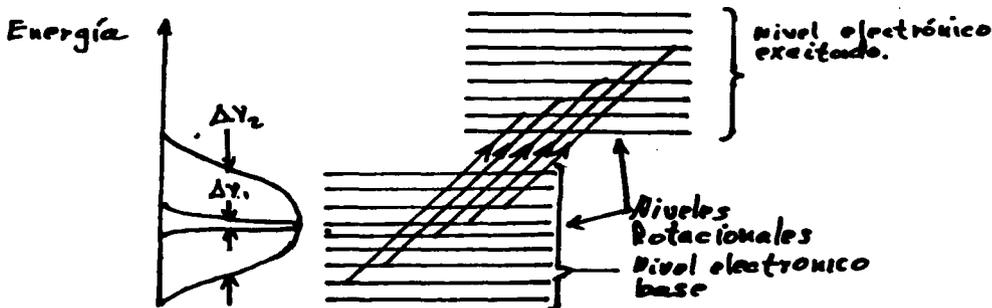


Fig. 1.6 Niveles rotacionales de dos niveles electrónicos.

La radiación con un ancho $\Delta\nu_2$ puede enviar al estado excitado a todos los niveles que traslapa, mientras que la otra con un ancho $\Delta\nu_1$, puede excitar selectivamente a un nivel rotacional. Precisamente esta última, es la técnica que se utilizó en este trabajo.

La teoría cuántica para perturbaciones dependientes del tiempo (señal armónica), en la aproximación dipolar y a primer orden, predice que la probabilidad de transición cerca de una resonancia, es: ⁽³⁾

$$|a_{km}|^2 = \frac{4E_0^2 \mu_{km}^2}{\hbar^2} \frac{\text{Sen}^2[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t]}{(\omega_{km}-\omega)^2}, \quad (1.14)$$

en donde E_0 es la amplitud del campo eléctrico; $\mu_{km} = \langle k|q|m \rangle$ es elemento de matriz; ω es la frecuencia angular de la señal electromagnética, ω_{km} es la frecuencia angular de resonancia, $\omega = 2\pi\nu$, y t es el tiempo.

Puesto que la radiación electromagnética perfectamente monocromática es una idealización, es necesario modificar la expresión 1.14, para concluir al ancho espectral de la radiación.

A pesar de que ese tema está perfectamente estudiado, conviene hacer un breve repaso de él, con el fin de aclarar cierta confusión que existe en la literatura.

La cantidad de energía electromagnética para un campo eléctrico E por unidad de volumen es: $U = kE^2$, en donde k depende de las unidades utilizadas. U se debe dar en erg/cm^3 si

se utiliza el sistema cgs. Guillory⁽⁴⁾ afirma que $U = \frac{e}{4\pi} E^2$ en donde E es la mitad de la magnitud del vector de amplitud eléctrica y postula que U está dado en $\text{erg/cm}^2 = \text{erg/cm}^3 / \text{cm}^{-1}$ y puesto que cm^{-1} son las unidades del número de onda $\nu = \frac{1}{\lambda}$, (que es una unidad de frecuencia), entonces U es la energía por unidad de volumen y unidad de número de onda. De este postulado se puede sustituir en 1.14 a dE^2 .

Otros textos, por ejemplo Bethe⁽⁵⁾, consideran necesario utilizar otra función: $n(\nu) = \frac{dU}{d\nu}$, como la energía por unidad de volumen y número de onda. De esta última expresión, que será la utilizada en este trabajo, se obtiene para la energía: $dU = n(\nu) d\nu$ y de ahí:

$$dE^2 = \frac{4\pi}{6} n(\nu) d\nu, \quad \text{con} \quad \nu = \frac{\omega}{2\pi c}$$

la expresión 1.14 queda:

$$d|a_{km}|^2 = \frac{4\pi |\mu_{km}|^2}{3c\hbar^2} \frac{\text{Sen}^2[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t]}{(\omega_{km}-\omega)^2} d\omega$$

Considerando la aditividad de la probabilidad, se tiene:

$$|a_{km}|^2 = \frac{4|\mu_{km}|^2}{3c\hbar^2} \int \frac{\text{Sen}^2[\frac{1}{2}(\omega_{km}-\omega)t]}{(\omega_{km}-\omega)^2} n(\omega) d\omega. \quad (1.15)$$

La integración en todo el intervalo de los reales es convencional.

* Bethe la llama I.

Para integrar la expresión 1.15 es conveniente considerar algunas características de las funciones que intervienen:

El ancho de la función:

$$\frac{\text{Sen}^2 [1/2 (\omega_{km} - \omega) t]}{(\omega_{km} - \omega)^2}, \quad (1.16)$$

es aproximadamente $\Delta = 1/t$. En experimentos en los que el sistema bajo estudio se encuentra en celdas o cuando la luz es incoherente, son típicos los tiempos de $t \sim 10^{-10}$ seg., lo que da un ancho para 1.16 de algunos G Hertz.

Si la función $\pi(\omega)$ es apreciablemente mas angosta que el ancho Δ , (lo cual puede ocurrir con la luz láser), la expresión 1.15 se modifica por:

$$|a_{km}|^2 = \frac{4 |\mu_{km}|^2}{3c \hbar^2} \frac{\text{Sen}^2 [1/2 (\omega_{km} - \omega') t]}{(\omega_{km} - \omega')^2} \int_{-\infty}^{\infty} \pi(\omega) d\omega,$$

la integración de esta última expresión conduce de nuevo a la energía U y por tanto:

$$|a_{km}|^2 = \frac{4}{\hbar^2} E_0^2 |\mu_{km}|^2 \frac{\text{Sen}^2 [1/2 (\omega_{km} - \omega') t]}{(\omega_{km} - \omega')^2}, \quad (1.17)$$

esta fórmula no difiere en nada de la 1.14 haciendo parecer inútil al proceso intermedio.

Para que la For. 1.17 sea correcta, debe ser cierto que $\Delta\eta(\omega) \ll \frac{1}{t}$ y además, el argumento ω , se debe evaluar en el pico de la función ω' . ($\eta(\omega)$ juega el papel de una función delta).

Además, considerando que los tiempos son muy pequeños y que interesan los casos cerca de la resonancia $\omega_{km} \approx \omega$, la última expresión se aproxima por:

$$|a_{km}|^2 = \frac{t^2}{\hbar^2} E_0^2 |\mu_{km}|^2 \quad (1.18)$$

Esta expresión difiere de la que usualmente se obtiene de la teoría de perturbaciones en la dependencia cuadrática con el tiempo. Esto se debe a la consideración de que $\eta(\omega)$ es angosta, contrario a lo que normalmente se supone.

Toda la teoría antes expuesta (perturbaciones a primer orden), es válida bajo la suposición de que (3)

$$\frac{1}{t} \gg \frac{|H_{km}|}{\hbar}, \quad |H_{km}| = E_0 |\mu_{km}|. \quad (1.19)$$

Esta condición no se cumple en los experimentos que se describen en este trabajo, por dos razones:

- Los elementos de matriz H_{km} son grandes porque los campos eléctricos son grandes.
- Los tiempos de perturbación son grandes considerando la alta coherencia temporal de la luz láser; y además porque en un haz molecular los procesos de relajamiento colisional son casi inexistentes.

Aunque es posible utilizar la teoría de perturbaciones de orden superior ⁽⁸⁾ aquí utilizaremos el tratamiento de Feynman-Vermon-Hellwarth. ^{(3), (9)}

Este tratamiento originalmente fue propuesto para la radiación en la zona de microondas, en donde la emisión espontánea es de muy baja probabilidad. En los experimentos descritos en este trabajo la emisión espontánea no es improbable, pero la existencia de otros canales de decaimiento permiten utilizar el trabajo de Feynman.

En ese cálculo, la ecuación de Schrödinger se resuelve exactamente para la perturbación armónica y la única aproximación para nuestra aplicación, es la de considerar un sistema cuántico de dos niveles. Esta aproximación es buena, puesto que ~~s~~ tiene al sistema en resonancia.

Sin entrar con detalles del cálculo de Feynman, sólo presentaremos el resultado para utilizarlo en nuestro caso.

Los dos niveles cuánticos se presentan con las funciones de onda ψ_a y ψ_b de tal forma que la función de onda total es:

$$\psi = a \psi_a + b \psi_b \quad , \quad \text{con:}$$

$$|a|^2 = 1 - \left(\frac{\omega_1}{\omega_0}\right)^2 \text{Sen}^2 \left(\frac{\omega_0 t}{2}\right), \quad (1.20)$$

$$|b|^2 = \left(\frac{\omega_1}{\omega_0}\right)^2 \text{Sen}^2 \left(\frac{\omega_0 t}{2}\right). \quad (1.21)$$

En donde ψ_b es el nivel superior y:

$$\omega_I = -\frac{2\mu E}{\hbar} \quad ,$$

$$\omega_c = \left[\left(\frac{2\mu E}{\hbar} \right)^2 + (\omega_0 - \omega)^2 \right]^{1/2} \quad (1.23)$$

El factor 2 que afecta a la amplitud eléctrica E, es correcto si se supone la presencia de luz polarizada circularmente.

Si la luz esta linealmente polarizada este factor se cambia por 1. Además, $\mu = \langle a | \mu | b \rangle$ y ω es la frecuencia vista por el sistema cuántico de dos niveles (incluyendo el corrimiento Doppler), ω_0 es la frecuencia de resonancia.

$|a|^2$ y $|b|^2$ son, como es usual, las probabilidades de encontrar al sistema en uno o el otro nivel cuando ha transcurrido un tiempo t.

En la fig. 1.7: se muestra la evolución del sistema con respecto al tiempo cuando $\omega_0 = \omega$ (resonancia perfecta).

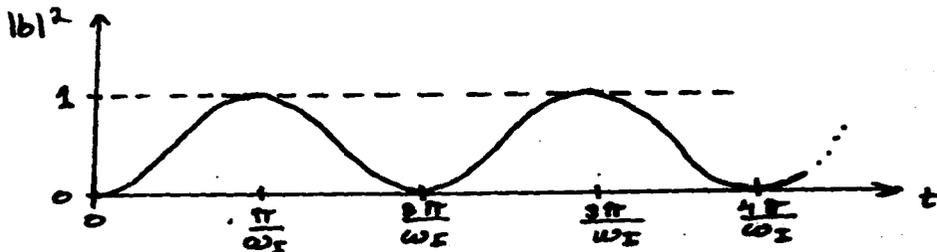


Fig. 1.7 Evolución de la probabilidad

Este comportamiento ocurre sólo si no se presenta el fenómeno de emisión espontánea, pues en caso de que una fluctuación

del vacío. induzca una transición del estado b al estado a, la coherencia de la oscilación de la probabilidad se pierde.

En la fig. 1.8, se representa el tipo de transición inducida por el láser en la molécula de sodio.

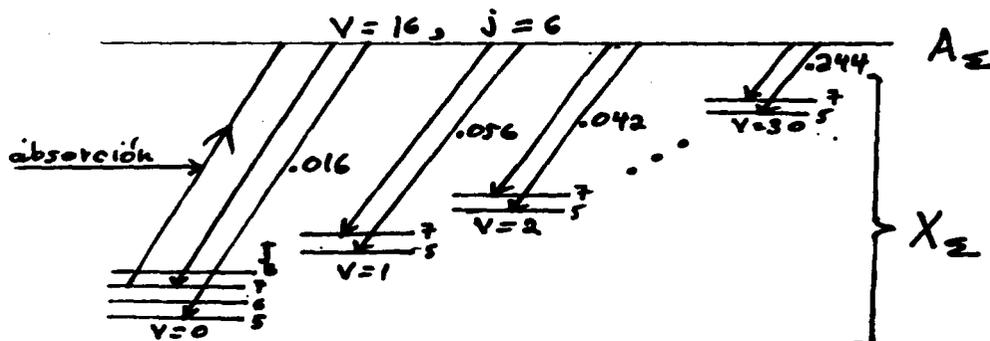


Fig. 1.8 Posibles decaimientos que siguen a una excitación electrónica en la molécula Na_2

El láser excita a la molécula desde el estado electrónico base X_2 con $V=0$ y $J=7$, hasta el estado electrónico excitado A_2 , $V=16, J=6$, en donde V y J son representativamente, el número vibracional y el rotacional.

Por emisión espontánea, el electrón decae según se muestra en la figura.

Los números al lado de las flechas que indican el decaimiento son los factores de Franck-Condon calculados por Kaminsky (10).

Sumando todos los factores (no todos se muestran), se encuentra que la probabilidad de que el sistema decaiga al nivel original es de 0.8%.

Esto significa que para fines prácticos, un electrón excitado al nivel A_2 no regresa a $v=0, J=7$ de X_2 . Creándose de esta manera un hueco en la población del estado inicial. (hole burning).

En cuanto a la fórmula de Feynman esto significa dos cosas:

- La oscilación (fig. 1.7) de la probabilidad no puede pasar mas allá de $t = \pi/\omega_1$, o sea $|b|^2 = 1$, porque la rapidez de la emisión espontánea deja vacío el nivel excitado. (posteriormente se cuantificarán los tiempos, para confirmar esta hipótesis).
- El hecho de que la probabilidad de decaer al nivel inicial sea despreciable, implica que no se perturba la coherencia de la probabilidad.

En estas dos afirmaciones se basa la legitimidad del uso de la fórmula de Feynman.

La fórmula 1.21. para el caso $\omega_0 = \omega$, y con el parámetro $\frac{\kappa E t}{\hbar} \ll 1$, se reduce a $|W|^2 = \frac{\kappa^2 E^2 t^2}{\hbar^2}$ que es justamente la que se había obtenido por perturbaciones a primer orden, (for. 1.18). Vale la pena notar que la condición para el parámetro $\frac{\kappa E t}{\hbar} \ll 1$ es la misma que la expresada en la For. 1.19. Puesto que $|b|^2$ es la probabilidad de estar en el nivel ψ_b y ya que la única forma de decaer es por fluorescencia; $|W|^2$ es proporcional a la fluorescencia emitida por de-

caimiento y por tanto si S es la magnitud de la fluorescencia:
 $S \propto \frac{A^2 t^2}{4^2} I$, en donde I es irradiancia luminosa incidente que como sabemos es proporcional a E^2 . O sea para $\frac{A E t}{4}$ pequeño, la fluorescencia depende linealmente de la intensidad luminosa incidente.

Ya se había mencionado que la velocidad de la molécula de sodio fue de $= 1.55 \times 10^5$ cm/seg. (pág. 10).

Puesto que la zona de interacción es de 2 mm, el tiempo de tránsito para el haz molecular a través de la luz del láser es de 1.29×10^{-5} seg. (cruzando perpendicularmente al haz)

Por otra parte, el elemento de matriz μ para los niveles excitados se puede obtener del tiempo de vida media τ dado por Steven ⁽¹¹⁾, y de la expresión:

$$\mu = \left(\frac{3 h \lambda^3}{64 \pi^4 \tau} \right)^{1/2},$$

y tomando en cuenta la degeneración $2j+1$ con $j=6$, se obtiene un valor para μ de 1.9×10^{-18} ESU. cm.

Usando este valor de μ y el tiempo de tránsito antes calculado se puede saber a que campo eléctrico $W^2=1$, y de ahí la irradiancia luminosa que es capaz de excitar a todas las moléculas, su valor es:

$$I = 0.7 \times 10^{-4} \frac{\text{m Watts}}{\text{m}^2}.$$

$\left(\frac{\omega_s}{\omega_e} \right)^2$ Si se toma en cuenta que a esta irradiancia la función en 1.21 tiene un ancho aproximado de $\Delta\nu = 0.077$ M Hertz y que el láser de tinte tiene un ancho aprox. 1 M hertz. Se

necesitan $0.8 \times 10^{-3} \frac{\text{m Watts}}{\text{mm}^2}$ para excitar todas las moléculas resonantes con el láser.

Según esta última afirmación, proporcionar mayor potencia al láser ya no daría como resultado mayor fluorescencia.

Sin embargo, esto no es cierto como se muestra a continuación.

Puesto que incluso las moléculas que no son perfectamente resonantes tienen cierta probabilidad de ser excitadas, es necesario tomarlas en cuenta.

Si $f(\omega)$ es la densidad molecular por unidad de número de onda, (no debe olvidarse que las distribuciones en velocidades conduce por efecto Doppler, a una distribución en frecuencia), la señal fluorescente total es:

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} |b|^2 f(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\omega_E}{\omega_F}\right)^2 \text{Sen}^2 \frac{\omega_0 t}{2} f(\omega) d\omega.$$

Para campos eléctricos pequeños: $\frac{2\mu E}{\hbar} \ll (\omega_0 - \omega)$,

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\mu E}{\hbar(\omega_0 - \omega)}\right)^2 \text{Sen}^2 \frac{(\omega_0 - \omega)t}{2} f(\omega) d\omega.$$

Esta última expresión coincide con la que se obtiene de la teoría de perturbaciones.

Si se considera que $f(\omega)$ es una función muy ancha comparada con $\left(\frac{1}{\omega_0 - \omega}\right)^2$ (que es nuestro caso), y si se usa el valor conocido de la integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Sen}^2 \alpha t/2}{\alpha^2} d\alpha = \frac{\pi t}{2},$$

se obtiene:

$$S = \frac{2\pi\mu^2 E^2 t}{\hbar^2} \rho(\omega_0),$$

que es la conocida regla de oro.

Para el caso: $\frac{2\mu E}{\hbar} \approx (\omega_0 - \omega)$

y $\frac{\omega_0 t}{2} \geq \pi/2$, $\text{Sen}^2 \frac{\omega_0 t}{2}$

se sustituye por 1 de acuerdo al párrafo a) de la pág. 23 se tiene:

$$S(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(2\mu E/\hbar)^2}{(2\mu E/\hbar)^2 + (\omega_0 - \omega)^2} \rho(\omega) d\omega$$

Considerando de nuevo a $\rho(\omega)$ constante (o muy ancha), se tiene:

$$S(E) = \frac{2\mu E}{\hbar} \text{Arctg} \frac{\hbar}{2\mu E} \Big|_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega_0) = \frac{2\pi\mu E}{\hbar} \quad (1.24)$$

puesto que la irradiancia I es:

$$I = cE^2 / 8\pi,$$

se tiene:

$$S(I) = 14.3 \times 10^8 \rho I^{1/2}, \quad I \left(\frac{\text{mWatts}}{\text{cm}^2} \right). \quad (1.25)$$

Es en esta expresión en donde se muestra el fenómeno de saturación. La señal fluorescente ya no depende linealmente de la irradiancia.

Finalmente, incorporando los siguientes datos:

Eficiencia de recolección óptica = .005

Densidad molecular por unidad de frecuencia angular = $1.9 \times 10^2 \text{seg}$

Proporción de la población inicial = 0.16

Eficiencia cuántica del fotomultiplicador = .15

Factor por luz linealmente polarizada = .5

Todas estas magnitudes entran como factores de la expresión 1.25, de la que finalmente se obtiene:

$$S'(I) = 3.7 \times 10^6 I^{1/2} \quad (1.26)$$

(las unidades de $S'(I)$ son cuentas/seg)

La comparación entre esta expresión y los resultados experimentales, se muestra en la gráfica de la Fig. 1.9.

La atenuación de la irradiancia luminosa se obtuvo utilizando filtros de densidad, neutros, pues modificar la irradiancia de salida del láser sintonizable, produce la desestabilización de éste. (de hecho hay un mínimo de potencia de salida).

Conviene mencionar en este punto que la no linealidad de la expresión 1.26, da lugar a la espectroscopía de saturación que tanta importancia tiene actualmente⁽¹²⁾.

Cuentas/seg

$\times 10^6$

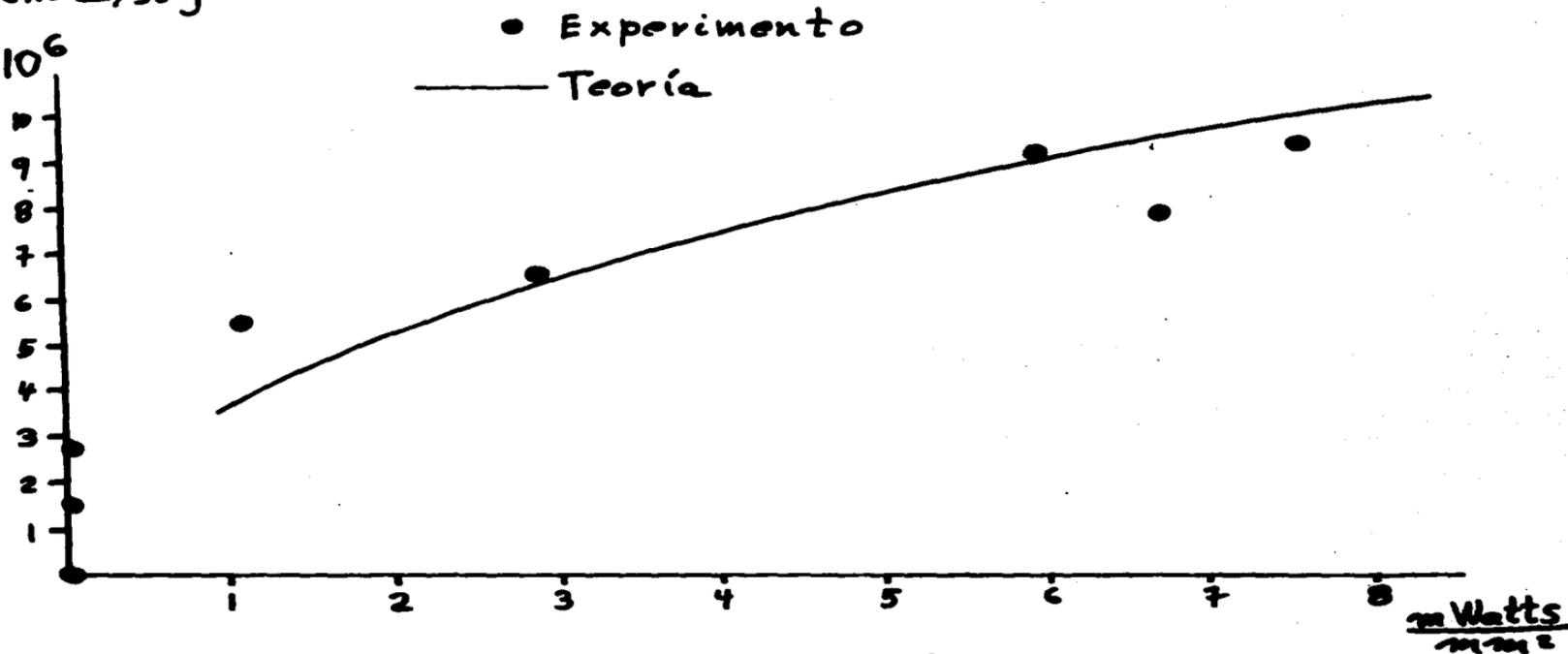


Fig. 1.9 Fluorescencia vs. Irradiancia,
en un haz de Sodio molecular.

CAPITULO II. ESPECTRO MOLECULAR DEL SODIO

2.1 PRODUCCION DE UN HAZ MOLECULAR POR EXPANSION
SUPERSONICA DE UN GAS

En el capítulo anterior se mencionó la excitación con láser de un haz de sodio molecular. Para producir este haz, se puede utilizar el proceso efusivo con un horno que se calienta a la temperatura adecuada para tener una presión de vapor apreciable. De esta manera se obtiene un haz de sodio molecular (y también atómico), con muchos niveles vibracionales y rotacionales poblados. Por esta razón la población por nivel es pobre.

Además, en el régimen efusivo los flujos moleculares son pequeños.

Por lo supuesto, es imposible tener un haz molecular de sodio "frío", producido únicamente por la efusión de éste, pues incluso a temperatura ambiente es sólido.

La forma adecuada de lograr un haz frío, es la de utilizar la técnica del chorro de expansión supersónica o fuente de flujo hidrodinámico, con algún gas noble en el que se "siembra" el sodio.

En la fig. 2.1 se muestra una fuente molecular de este tipo.

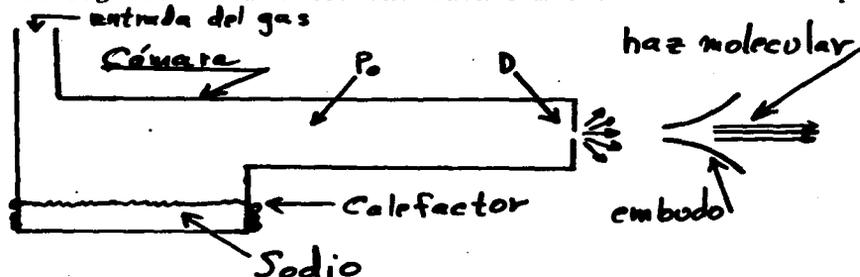


Fig. 2.1 Esquema de la fuente de sodio molecular.

En esa fig. P_0 es la presión del gas en la cámara y D el diámetro del orificio. Suponemos que el espacio fuera de la cámara esta al vacío. El propósito del embudo (Skimmer), es definir al haz, además de permitir un bombeo diferencial que se describirá posteriormente.

Si la trayectoria libre media en la cámara es mayor que el diámetro del orificio $\lambda > D$, se tiene un régimen efusivo, que corresponde a una expansión libre adiabática irreversible. En el caso contrario $\lambda < D$, se presenta el flujo hidrodinámico que se puede considerar una expansión isentrópica, que por tanto conduce al enfriamiento del gas⁽¹⁵⁾. Este tipo de expansión, también conocido como expansión supersónica, (porque el gas se mueve a una velocidad mayor que la velocidad local del sonido), se utilizó para la producción del haz molecular.

En la fig. 2.2 se muestra un tubo de flujo saliendo de la fuente.

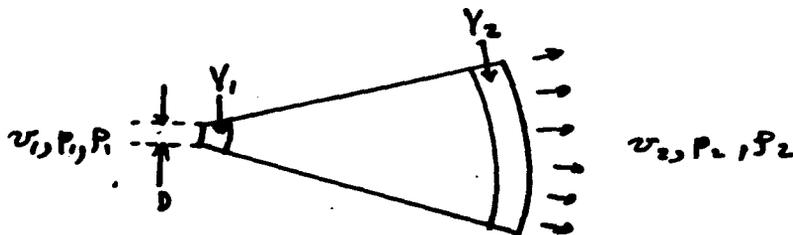


Fig. 2.2 Variables importantes de la expansión gaseosa.

$U, P \times P$, son respectivamente velocidad, presión y densidad.

Por E_1 y E_2 se denotarán las energías internas por unidad de masa de los volúmenes marcados como V_1 y V_2 , cada uno de ellos conteniendo la misma masa m .

Si se expresa la diferencia $E_2 - E_1$ en función de la entalpía por unidad de masa para cada uno de los volúmenes, se obtiene:

$$E_2 - E_1 = \frac{H_2 - H_1}{m} - \frac{P_2 V_2 - P_1 V_1}{m} \quad (2.1)$$

en donde P_2 y P_1 son las respectivas presiones. Puesto que $dH = d\phi + V dp$, y ya que el proceso es adiabático se obtiene, con $d\phi = 0$

$$H_2 - H_1 = \int_{P_1}^{P_2} V dp, \text{ con } P_2 V_2^\gamma = P_1 V_1^\gamma, \gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad (2.2)$$

Integrando la última expresión queda:

$$\frac{H_2 - H_1}{m} = - \frac{P_1 V_1}{m} \left(\frac{1}{1 - \frac{1}{\gamma}} \right), \quad (2.3)$$

la expresión se consideró completa así que $P_2 = 0$.

Sustituyendo en 2.1, y considerando gas ideal, se obtiene:

$$E_2 - E_1 = \frac{R \theta}{AM} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right), \quad (2.4)$$

R es la constante universal de los gases; θ la temperatura inicial; A el número de Avogadro; M la masa atómica o molecular.

La expresión 2.4 cuantifica la forma en que la energía interna se transforma en energía traslacional, durante la expansión.

O sea: $\frac{1}{2} v^2 = E_2 - E_1$, de la que finalmente se obtiene:

$$v = \left[\frac{2R\theta}{AM} \left(\frac{1}{j-1} \right) \right]^{1/2} \quad (2.5)$$

Sustituyendo para un gas monoatómico $j = \frac{5}{2}$ y para la masa atómica de una mezcla He-Ne y $\theta = 863^\circ\text{K}$, se obtiene:

$$v = 1.3 \times 10^5 \text{ cm/seg} \quad .$$

Esta velocidad difiere poco de la medida experimental, por DVCD (cap. I). Debe notarse que se ha supuesto que el sodio permanece en equilibrio térmico con el gas expandido, lo cual es de esperarse tomando en cuenta que la presión parcial del sodio es mucho menor que la del gas.

La consideración de que la presión final sea cero, conduce por otra parte, a una temperatura final de cero absoluto. Por supuesto que esto no ocurre, pues el cálculo de las temperaturas finales de los diferentes grados de libertad del gas esta asociado con la posición en la que el embudo perturba la expansión; así como del momento en el que se pasa del régimen hidrodinámico al molecular.

Toennies y Winkelmann¹³; así como C.E. Klotz¹⁴, presentan un estudio detallado de los mecanismos de relajamiento final incluyendo efectos cuánticos.

Para los fines de este trabajo se procedió a medir las temperaturas del haz (traslacional, rotacional y vibracional), midiendo las poblaciones de los respectivos estados.

2.2 MEDIDA DE LAS TEMPERATURAS TRASLACIONAL, VIBRACIONAL Y ROTACIONAL.

La temperatura traslacional se puede medir directamente de la Fig. 1.4. Pues si consideramos como dispersión de la velocidad Δv , a la semianchura en la mitad del pico, tenemos una estimación cruda de la temperatura asociada a la dispersión de velocidades alrededor de la velocidad de traslación = 1.55×10^5 cm/seg, con $\Delta v = 7.3 \times 10^3$ cm/seg.

Para una distribución de Maxwell se cumple que

$$m \overline{\Delta v^2} \approx \frac{1}{2} k T,$$

k es la constante Boltzmann. Entonces:

$$T = \frac{2m \overline{\Delta v^2}}{k}, \quad \text{con } m_{N_2} = 76.8 \times 10^{-24} \text{ gm},$$

finalmente:

$$T_{\text{trasl.}} \approx 590 \text{ K}$$

La función de participación (rotacional) para una molécula diatómica homonuclear) es: ⁽¹⁰⁾

$$Z_{\text{rot}} = \sum_{j=0,2,4,\dots} g_0(2j+1) e^{-\frac{B}{kT_{\text{rot}}} j(j+1)} + \sum_{j=1,3,5,\dots} g_0(2j+1) e^{-\frac{B}{kT_{\text{rot}}} j(j+1)} \quad (2.6)$$

siendo por tanto la probabilidad para cada estado

$$P(J_{e,0}) = g_{e,0} (2j+1) e^{-\frac{B}{kT_{rot}} (j(j+1))} / Z_{rot} \quad (2.7)$$

con la constante rotacional $^{10}B = 0.155 \text{ cm}^{-1}$

ya que el spin nuclear del sodio es $I = 3/2$. Los pe-

sos estadísticos para los valores de J pares e impares son respec-

tivamente: $g_e = 3$, $g_o = 5$.

Por tanto para obtener la temperatura rotacional es necesario hacer una medida de la población rotacional, y después como es

usual, graficar $\ln P(j)$ vs. $j(j+1)$ para obtener el valor de $-B/kT_{rot}$.

Para obtener una muestra de la población rotacional se excitó electrónicamente del estado X al A. Un barrido en frecuencia del láser entonable permitió inducir la fluorescencia de la molécula pasando por cada uno de los niveles rotacionales. La irradiancia luminosa se redujo por un factor de 1000 para evitar la saturación, que conduce al ensanchamiento de las líneas.

La identificación de los niveles rotacionales se hizo midiendo la longitud de onda con un interferómetro tipo Michelson-Sagnac construido ex profeso, y del que se hace una descripción más adelante.

Por otra parte, el cálculo de la longitud de onda, para poder asignar los números cuánticos rotacionales se hizo usando la expresión:

$$\frac{1}{\lambda} = T(V', J') - T(V'', J'')$$

en donde V y J son respectivamente; el número vibracional y el rotacional, con V'' y J'' correspondiente al estado base.

Los valores de T son:

$$T(V', J') = \sum_i \sum_k Y'_{ik} (V' + \frac{1}{2})^i [J'(J'+1) - \Lambda'^2]^{ik}$$

$$+ \delta_{J', J''} \sum_i \sum_k \lambda'_{ik} (V' + \frac{1}{2})^i [J'(J'+1) - \Lambda'^2]^{ik} ;$$

$$T(V'', J'') = \sum_i \sum_k Y''_{ik} (V'' + \frac{1}{2})^i [J''(J''+1) - \Lambda''^2]^{ik} .$$

Estas expresiones que son desarrollos en series de potencias, tienen la forma propuesta por Dunhman⁽¹⁶⁾, y fueron actualizadas por Kusch y Hessel⁽¹⁷⁾, (10), quienes presentan un conjunto completo de tablas para los coeficientes Y_{ik} y λ_{ik} de los estados electrónicos $X' \leq g^+$ y $A' \leq u^+$. En estos estados el momento electrónico angular a lo largo del eje internuclear es $\Lambda = 0$ y la regla de selección prohíbe $\Delta J = 0$. En cuanto a la convergencia de las series de Dunhman, se debe hacer notar que no es necesario llegar a potencias altas, pues por ejemplo $Y_{04} = -6.4645470 \times 10^{-18}$ (10). Esto hace muy sencillo el cálculo de las longitudes de onda.

2.3 CONSTRUCCION DE UN MEDIDOR DE LONGITUD DE ONDA TIPO MICHELSON SAGNAC.

Como ya se dijo, para la medida de la longitud de onda del láser de tinte, se contruyó un interferómetro.

El diseño fue propuesto por F. V. Kowalsky⁽¹⁸⁾.

Esencialmente consiste de un interferómetro de Michelson, en el que uno de los espejos se desplaza una distancia del orden de un metro, mientras que el otro permanece fijo.

En la fig. 2.3 se presenta un esquema del dispositivo

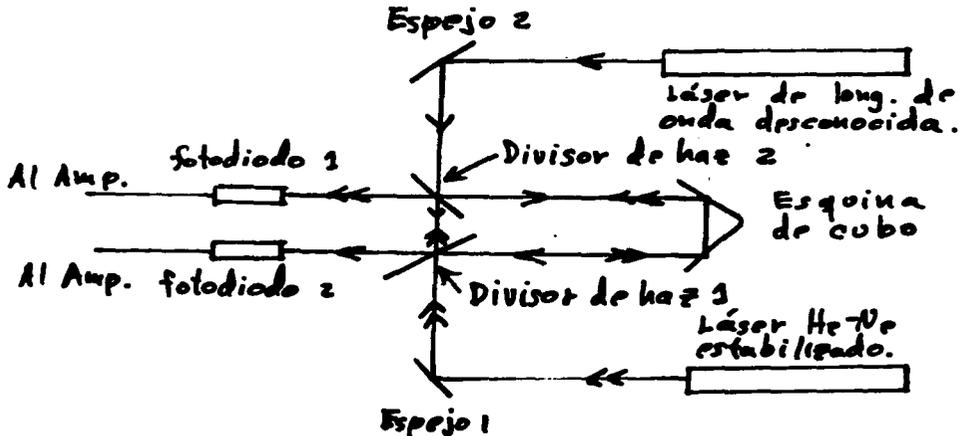


Fig. 2.3 Esquema del medidor de longitud de onda

En este esquema se ha representado con una flecha el viaje de la luz del láser de λ desconocida, y con doble flecha el del láser He-Ne.

Como se puede ver en el diagrama, la luz del He-Ne viaja hasta la esquina de cubo de donde regresa para interferir con el rayo directo, en el fotodiodo 1.

La luz del otro láser sigue exactamente la misma trayectoria pero en sentido inverso, para finalmente llegar a interferir en el fotodiodo 2.

Puesto que las trayectorias de ambos haces son las mismas, el desplazamiento de la esquina de cubo, genera una señal de interferencia en ambos fotodiodos. Como cada diodo recoge las interferencias de diferente láser, la razón de número de pulsos de un fotodiodo son respecto al otro, es la razón de las longitudes de onda.

En el diagrama de la fig. 2.4

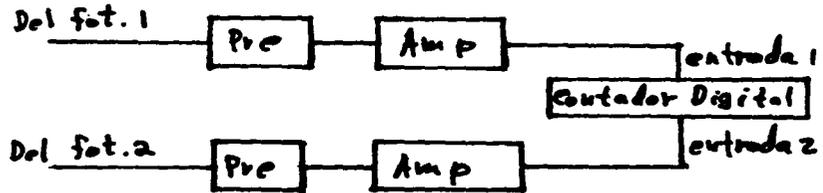


Fig. 2.4 Diagrama de bloques que muestra el manejo de las señales provenientes de los fotodiodos.

Se muestra el manejo de la señal proveniente de los fotodiodos. Si en el contador digital se pone, por ejemplo, que pare la cuenta cuando en la entrada 1 se presenten 10^6 cuentas; esto significará que la esquina de cubo ha recorrido

una distancia igual a 0.5×10^6 longitudes de onda del láser He-Ne.

En cambio en la entrada 2 se han contado el número de longitudes de onda para el otro láser.

Lo anterior significa que la relación entre longitudes de onda es:

$$\frac{\lambda_{\text{He-Ne}}}{\lambda_x} = \frac{\text{Cuentas en el contador} \pm 1 \text{ cuenta}}{10^6}$$

La incertidumbre de ± 1 cuenta, es debido a que no se cuentan fracciones de longitud de onda; y esto conduce a una incertidumbre de una parte en 10^6 .

Puesto que $\lambda_{\text{He-Ne}}$ para el láser estabilizado Tropel Mod. 100 es de 473612.29 G Hertz, (con todos los modos longitudinales cancelados excepto uno), es claro que se puede medir con una precisión de una parte en 10^6 .

Para mover la esquina de cubo, se monto ésta en un riel de aire y se diseñó un sistema automático para su movimiento de ida y regreso.

2.3 ESPECTRO ROTACIONAL: $N a_2, A' \Sigma_u^+ \leftarrow X' \Sigma_g^+$

En las siguientes páginas se muestran los resultados de identificar las líneas de las ramas P y R haciendo uso del interferómetro y de la expresión de Dunham. Las transiciones vibracionales del estado base y del estado excitado, fueron respectivamente $v''=0, v'=16$.

Las ramas R y P corresponden respectivamente a $\Delta J = -1, \Delta J = 1$, que son los cambios en el número cuántico rotacional al haber un decaimiento del estado electrónico excitado A, al estado base X.

El número entre paréntesis en R(J) y P(J), corresponde, como es usual, a los números rotacionales del estado base X.

En el espectro se muestran para cada línea: 1) La lectura del interferómetro. 2) El número de onda que se obtiene de la lectura del interferómetro. 3) La identificación del número cuántico que corresponde a la línea. 4) El número de onda calculado según la expresión de Dunham.

Hasta R(12) se proporcionan en la parte inferior de los espectros, la intensidad de la corriente en el fotomultiplicador. Esta corriente generada por la fluorescencia inducida, es indicativa de la intensidad de la línea.

Es importante hacer notar que la coincidencia entre los valores calculados y los medidos, garantizaba la corrección del procedimiento.

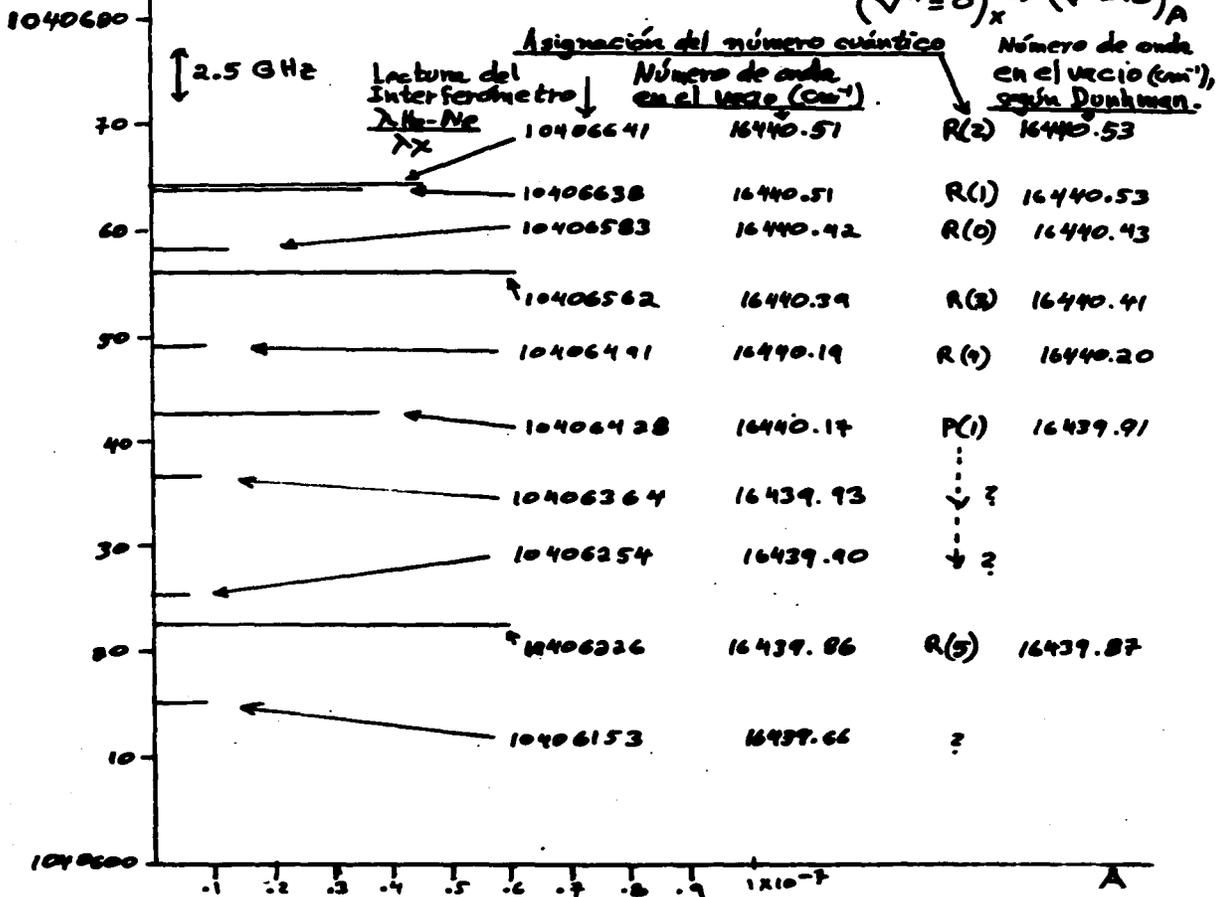
en los casos en que no se identificó o encontró una línea, se dejó una interrogación para hacerlo notar.

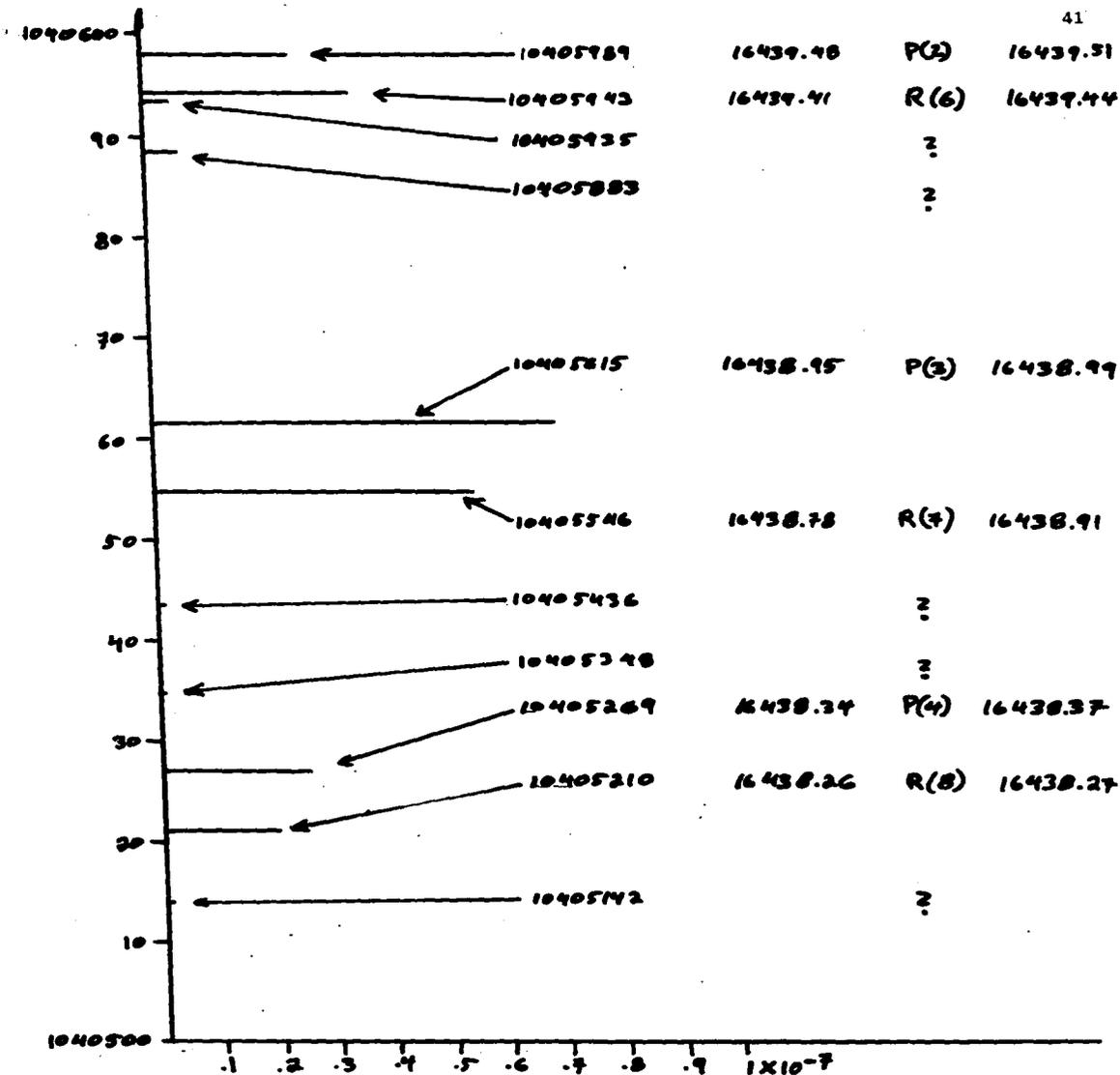
Finalmente en la Graf. 2.1, se muestran los resultados obtenidos para la corrida $V''=0, V'=21$, para los primeros valores de la rama P. De ahí se obtiene una temperatura rotacional de 26°K . Sin embargo es importante hacer notar que para valores grandes de $J > 15$, se obtuvieron temperaturas diferentes, lo cual sugiere que aún no se alcanza el equilibrio termodinámico.

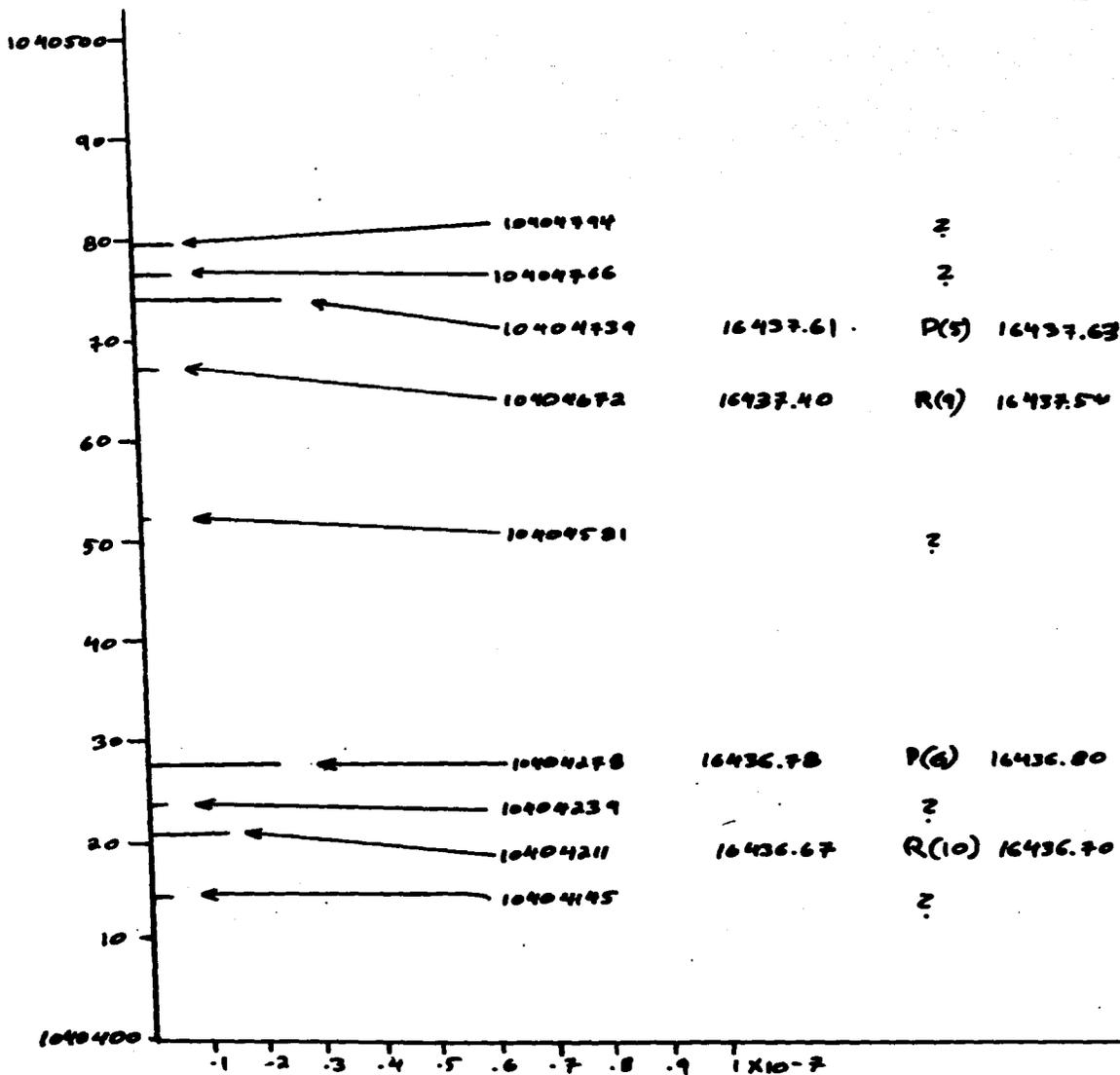
Además, por un procedimiento semejante se midió la temperatura vibracional, obteniéndose: $T_{\text{vib}} = 150^{\circ}\text{K}$.

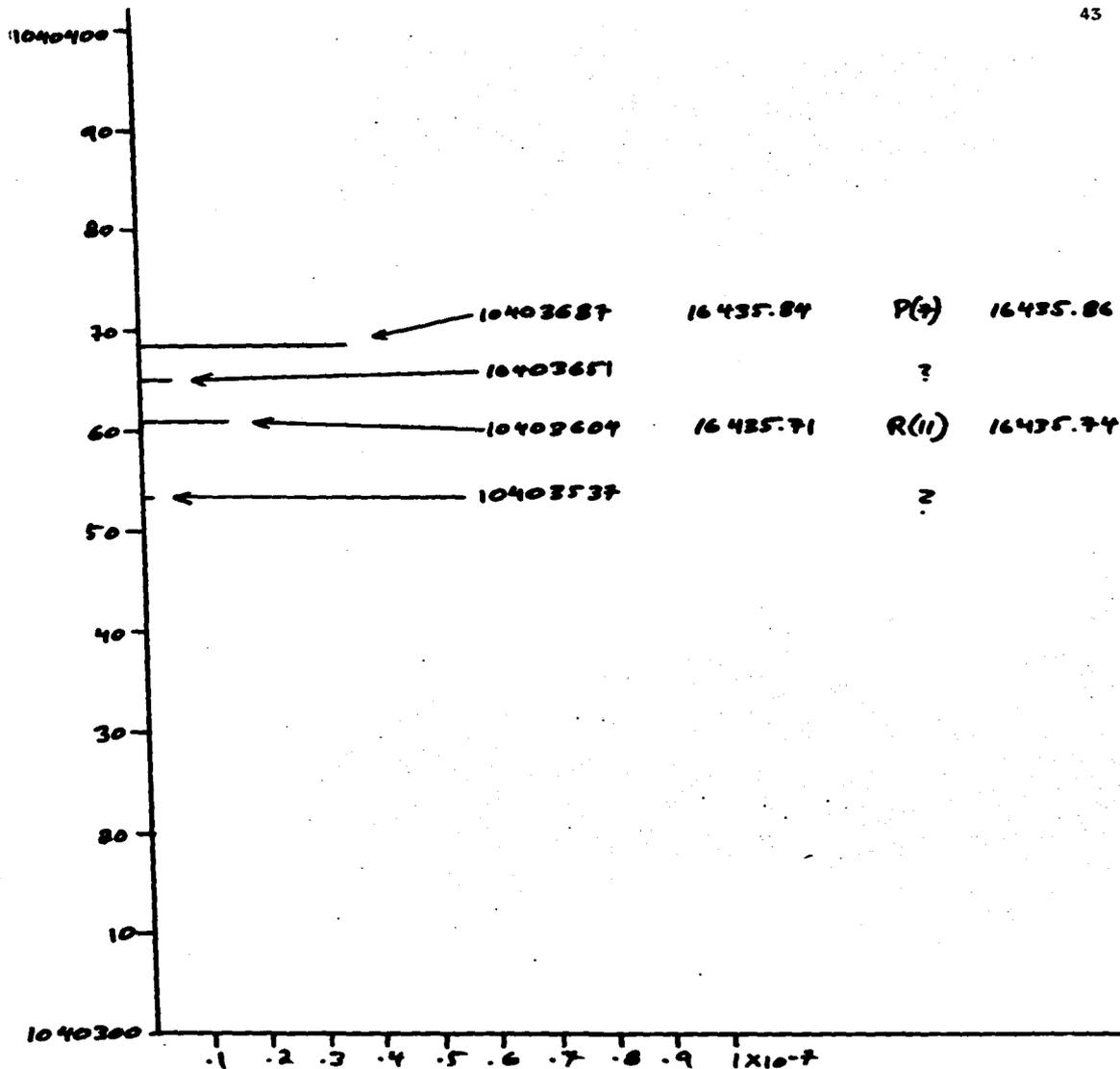
$$\frac{\lambda_{\text{He-Ne}}}{\lambda_X}$$

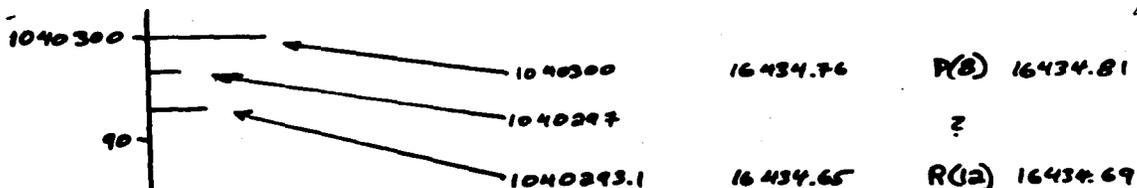
Espectro Rotacional: $\text{N}_2, A' \Sigma_u^+ \leftarrow X' \Sigma_g^+$
 $(v''=0)_X \rightarrow (v'=16)_A$



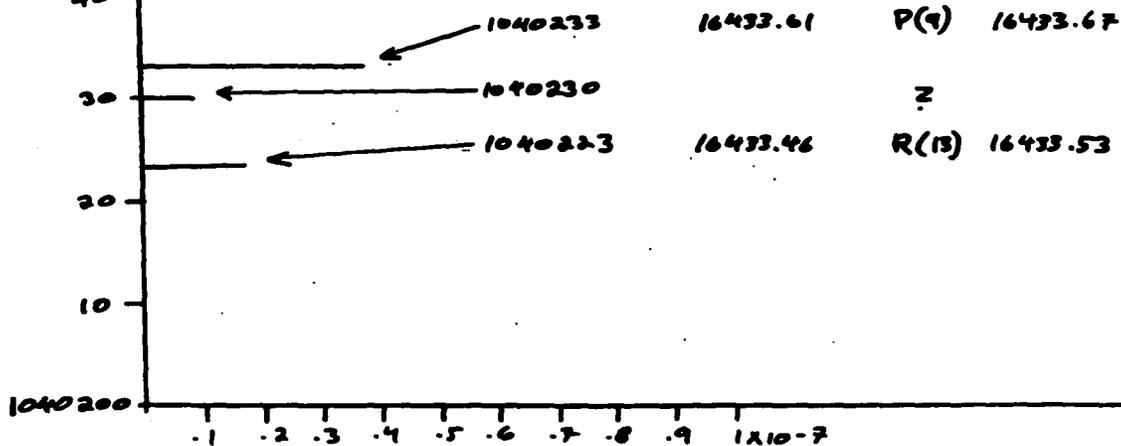


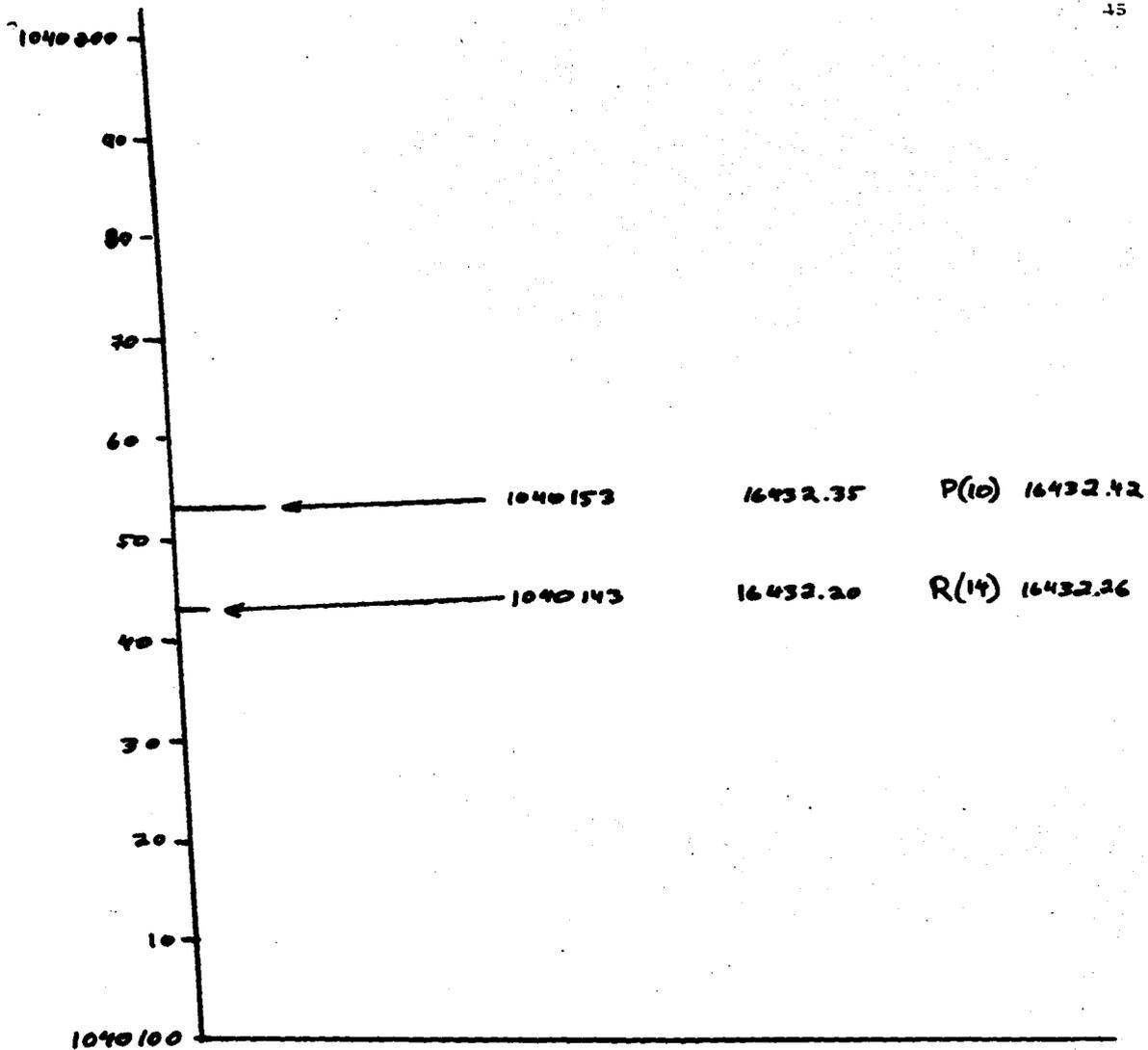


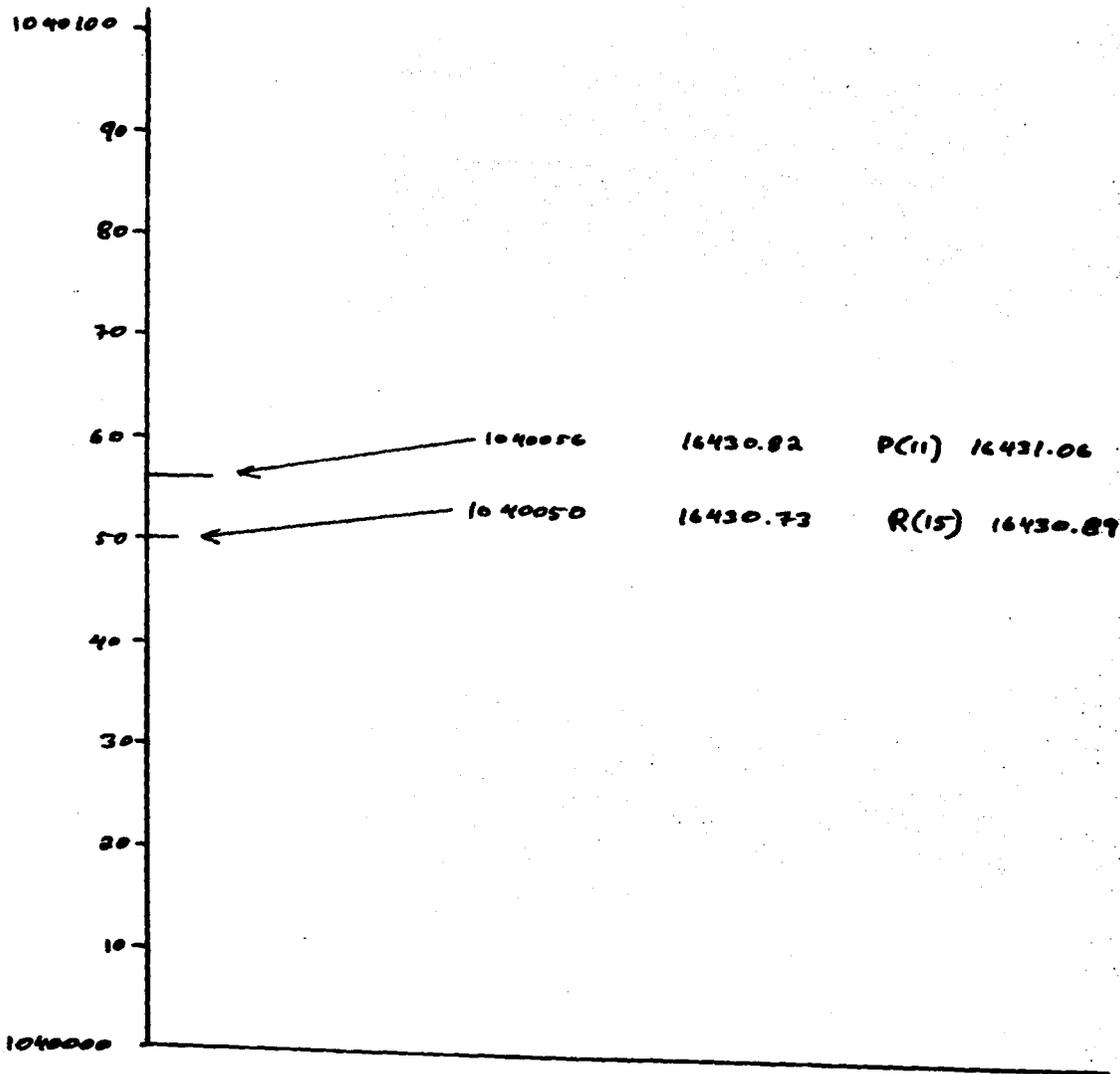


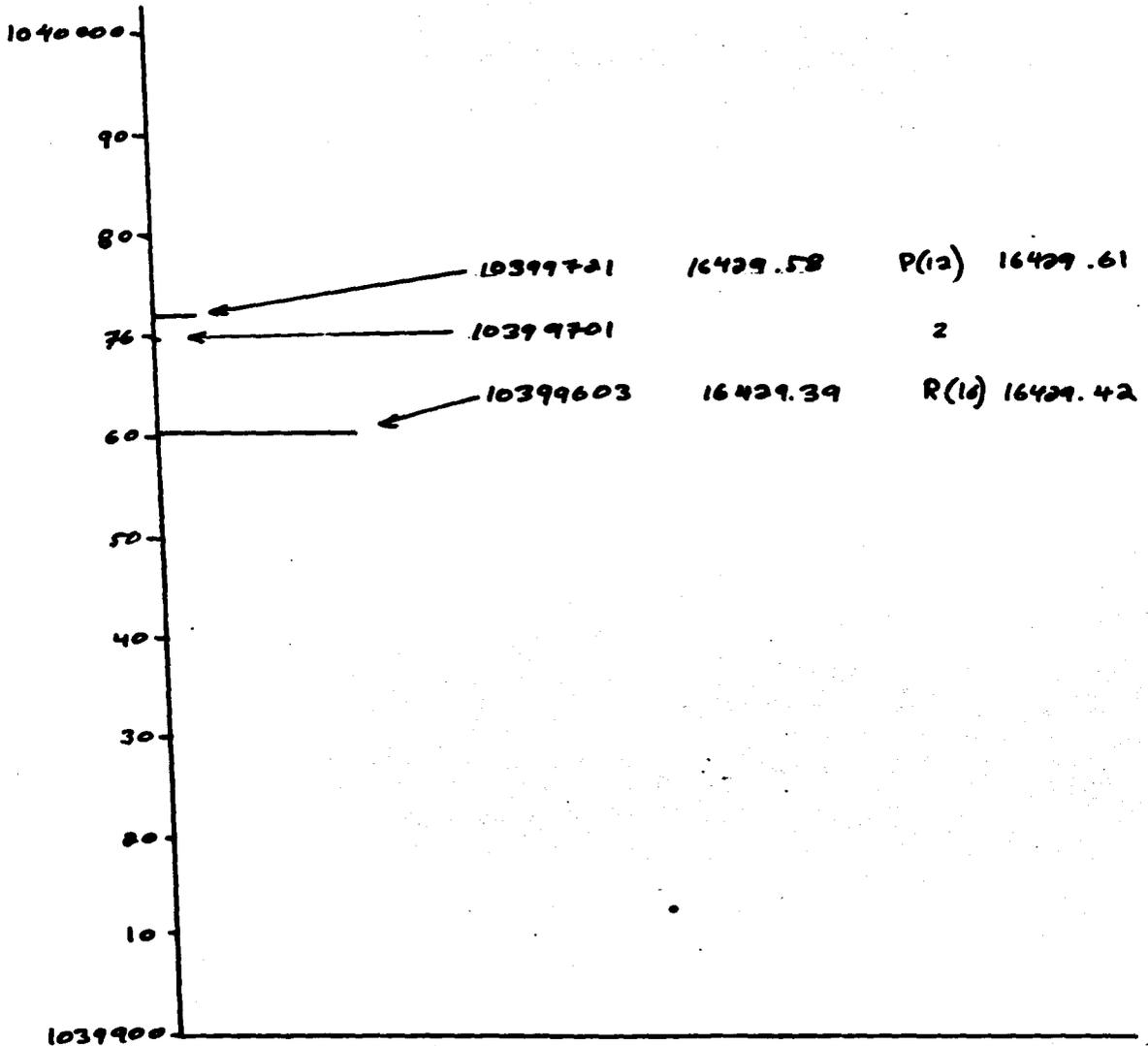


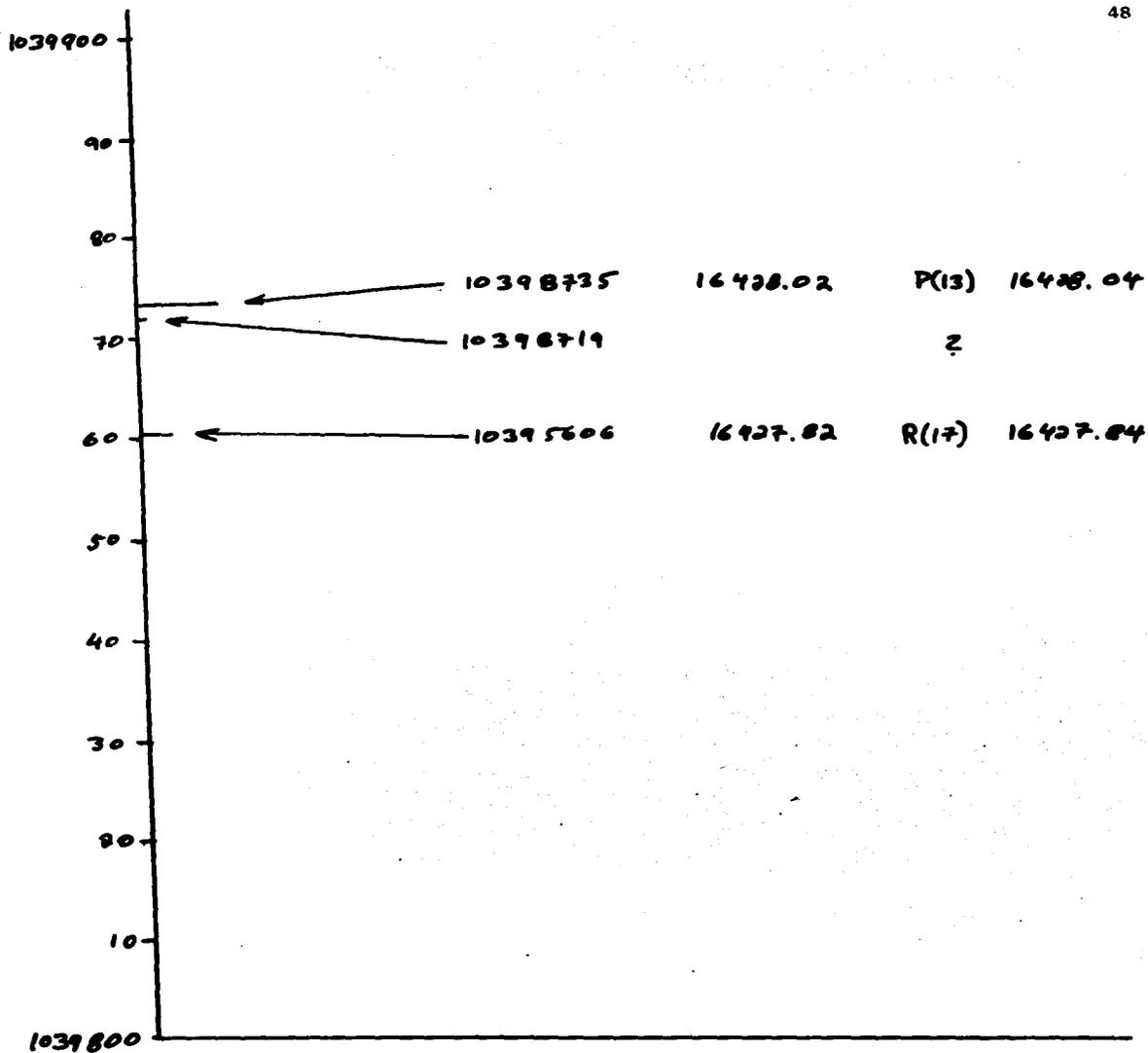
(A partir de este punto, unidades de intensidad arbitrarias)

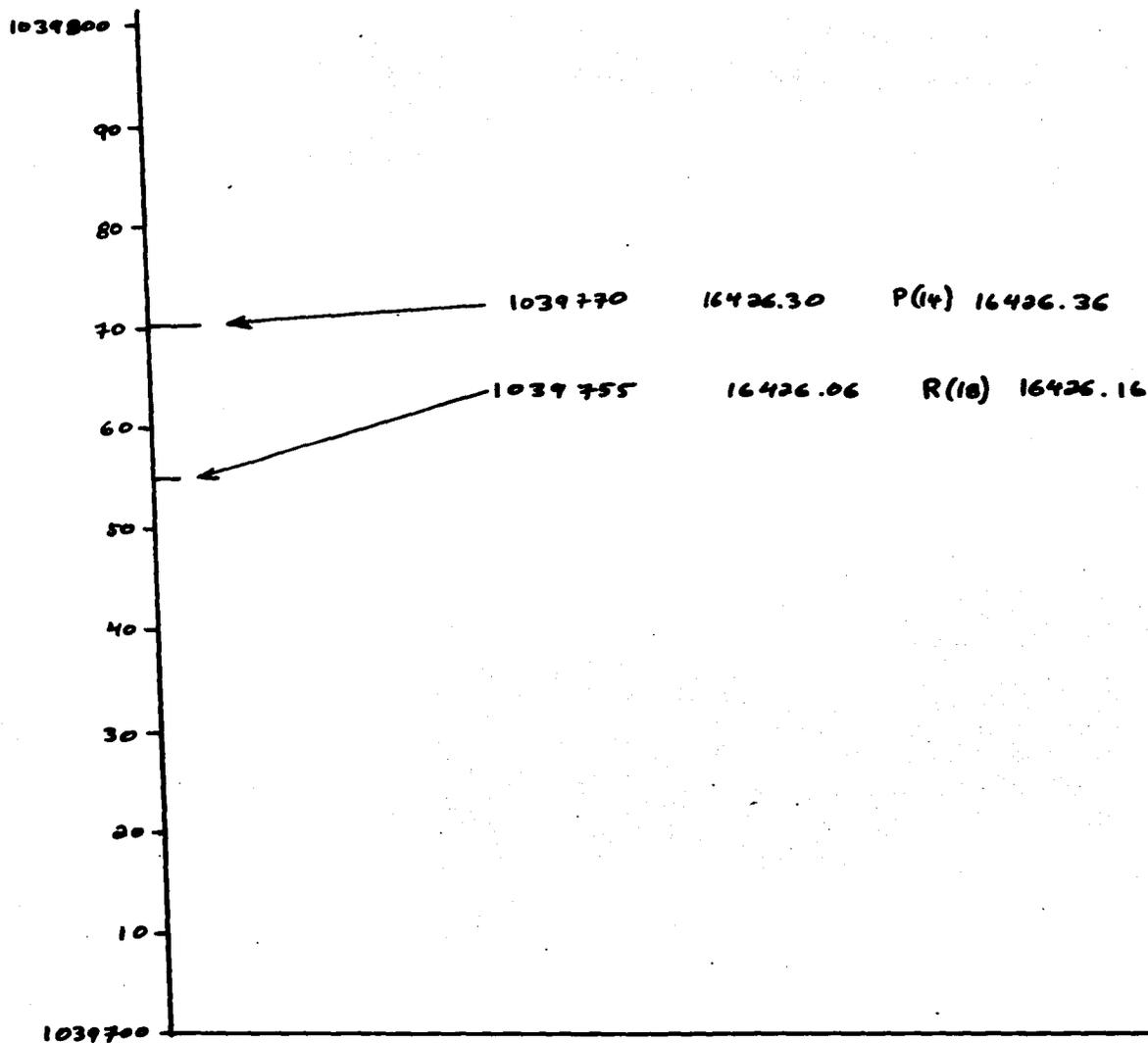




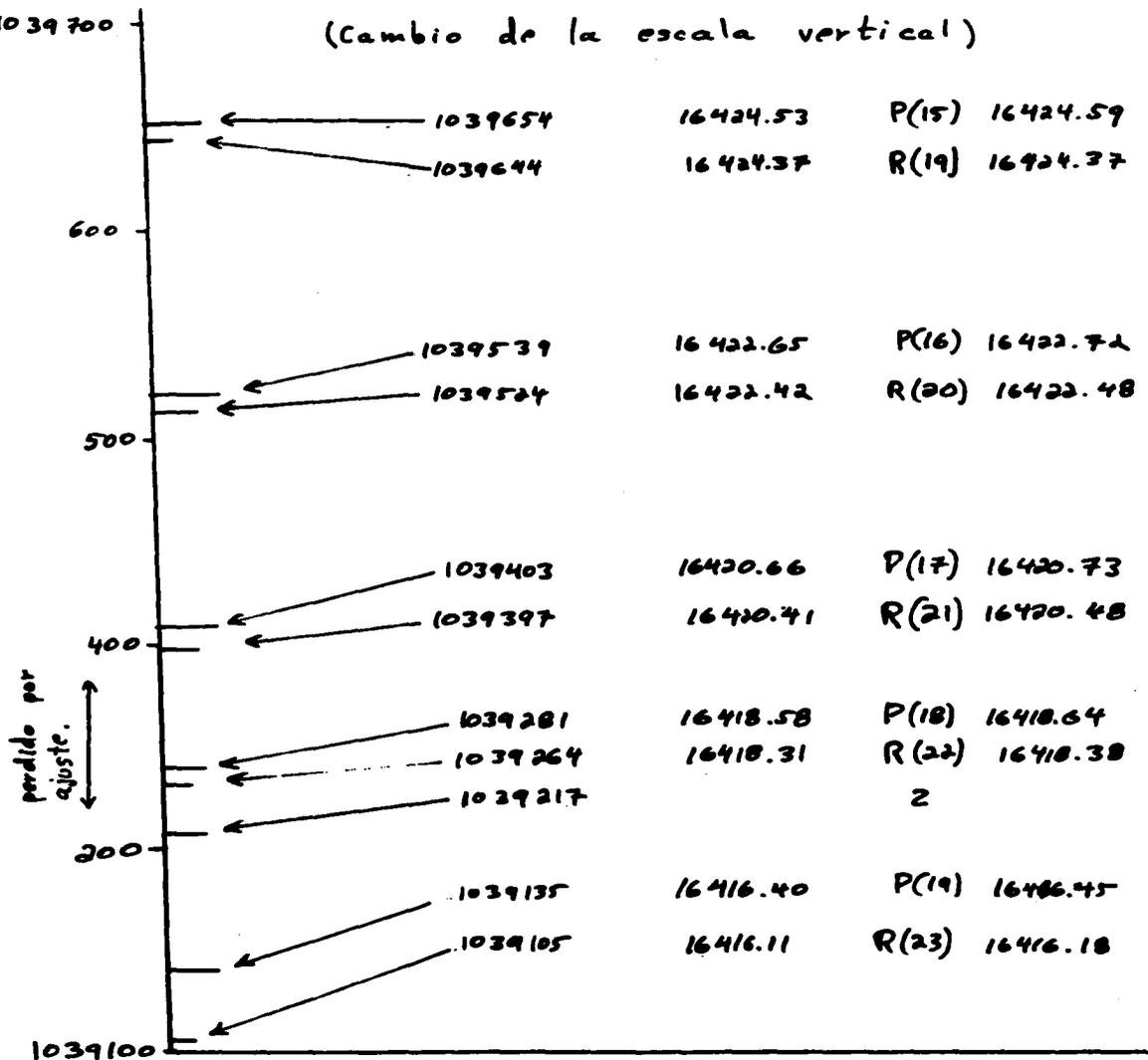




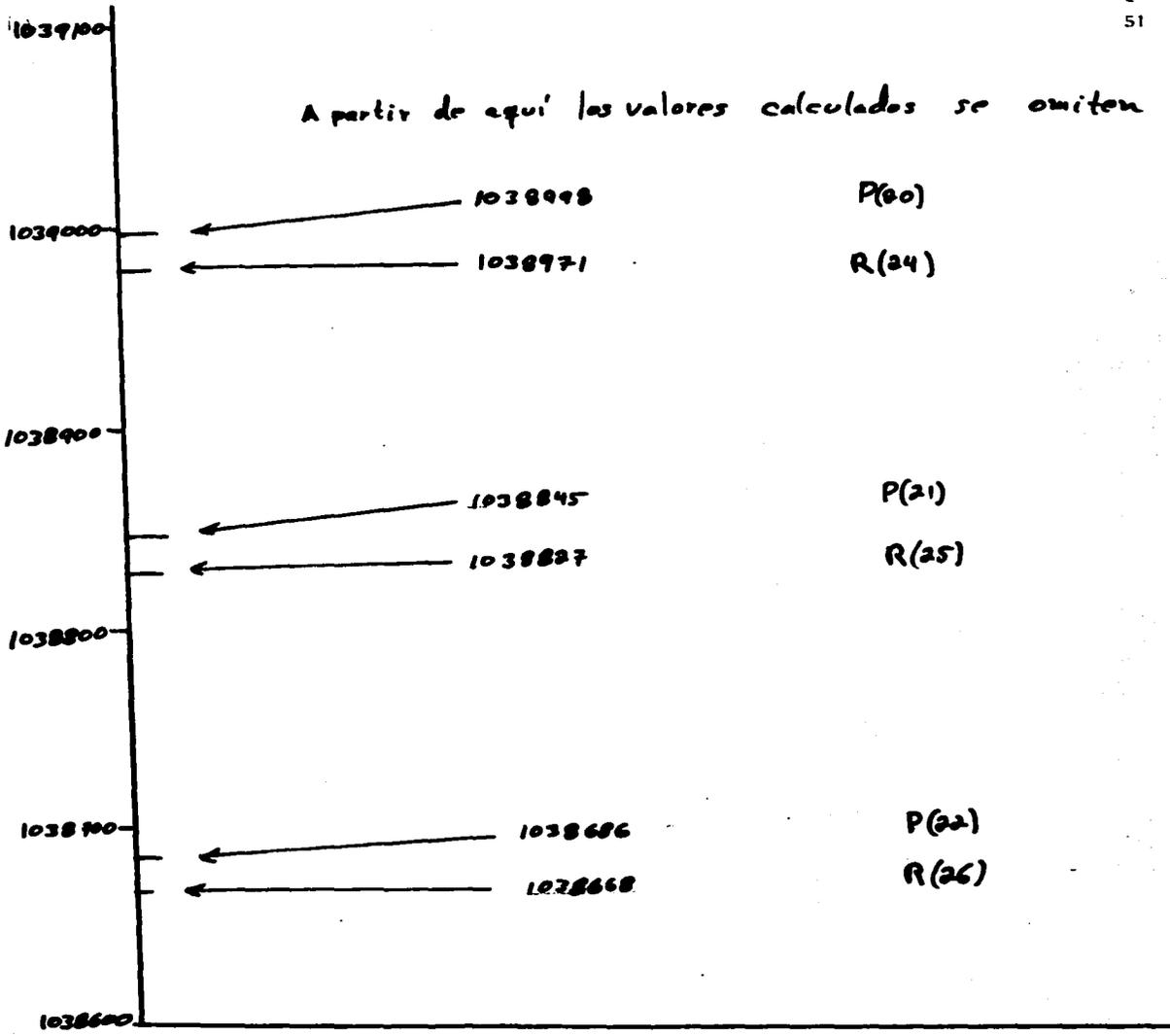


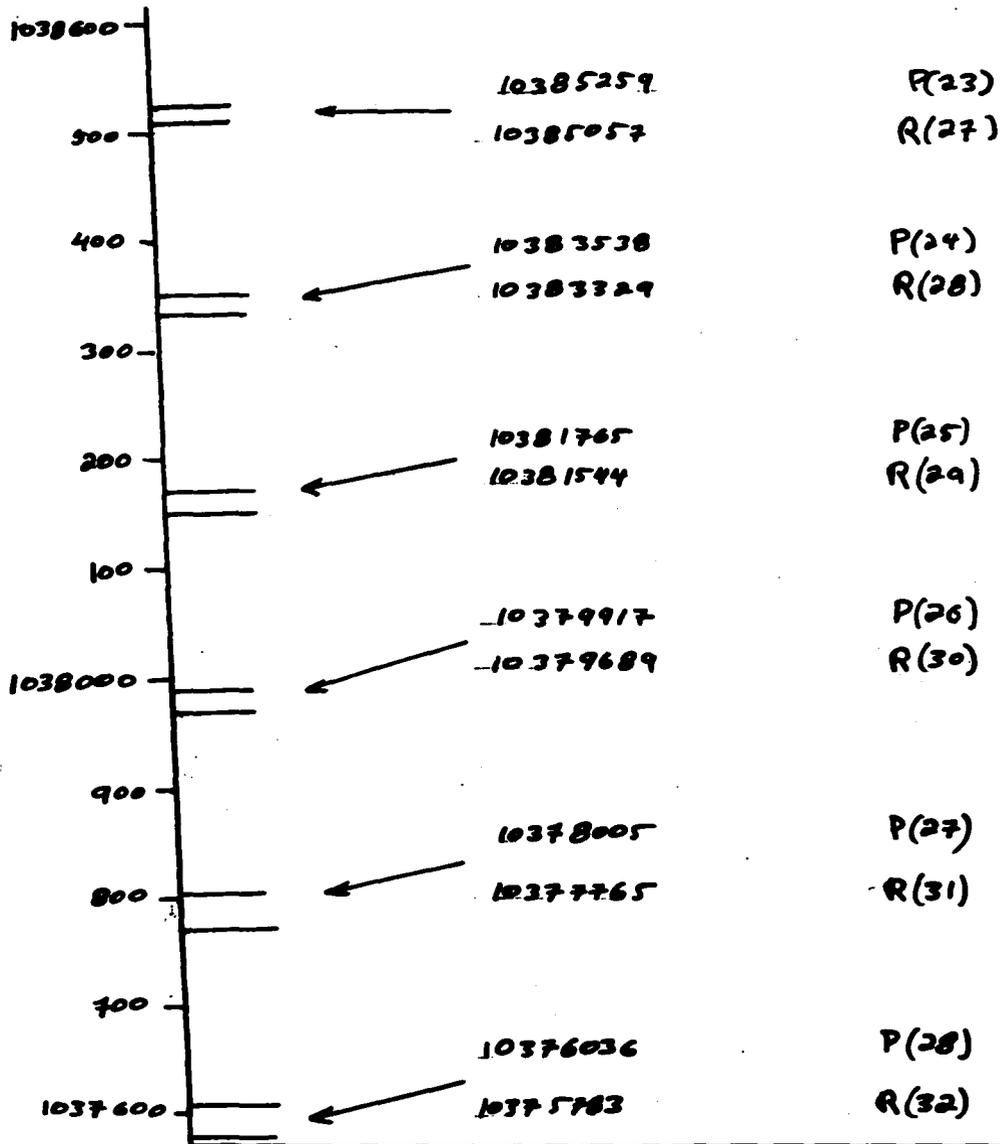


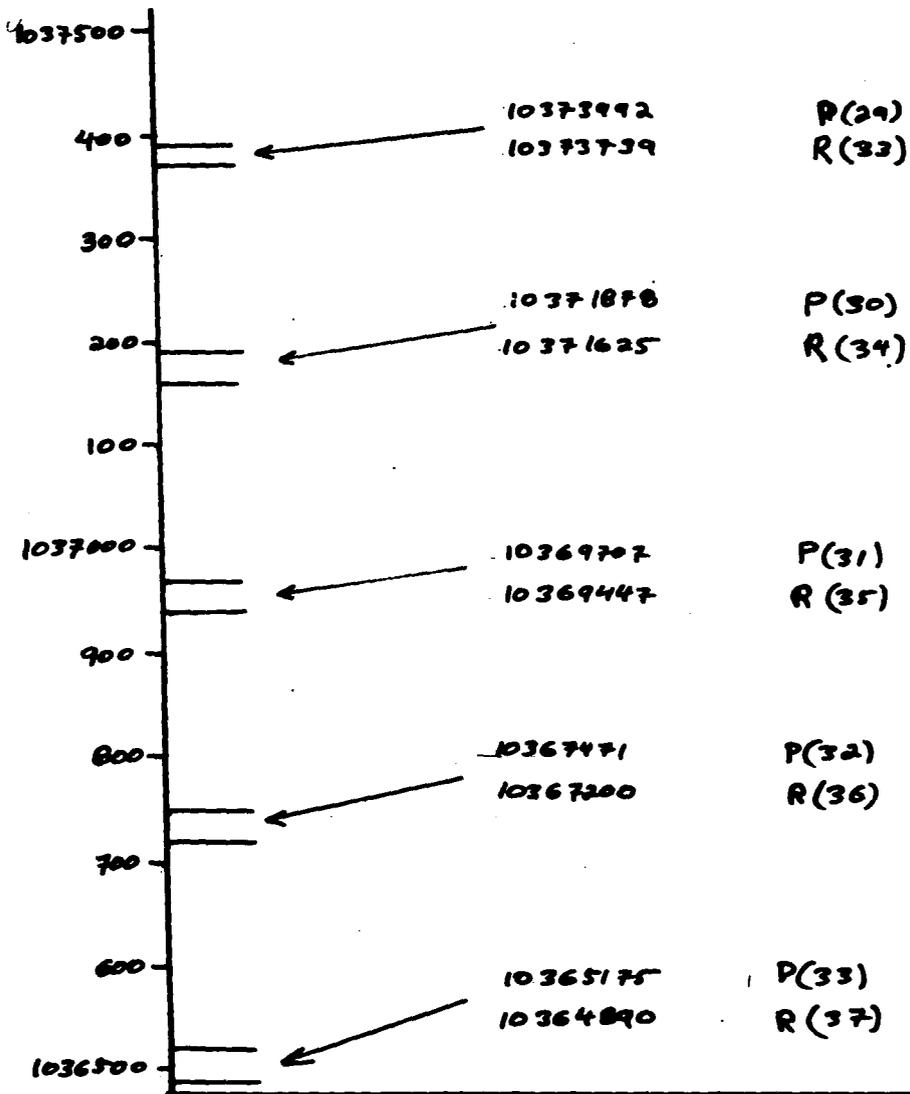
(Cambio de la escala vertical)

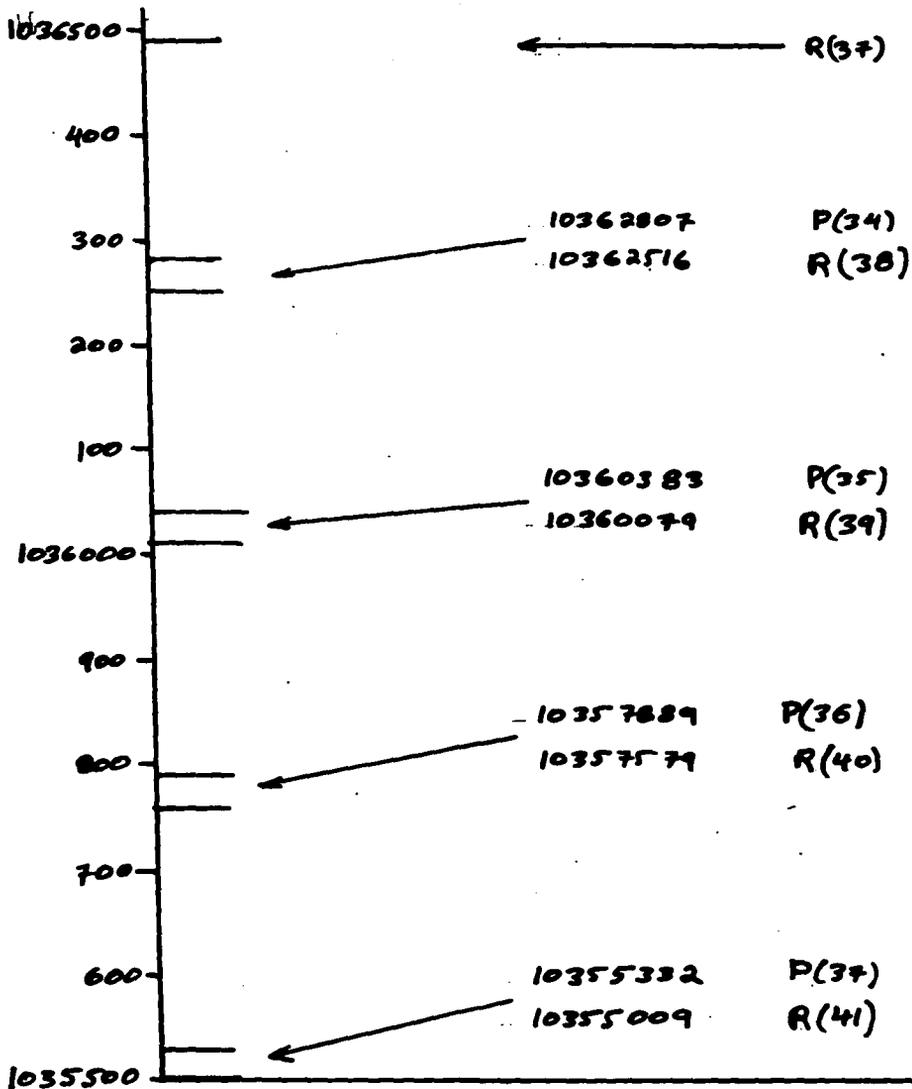


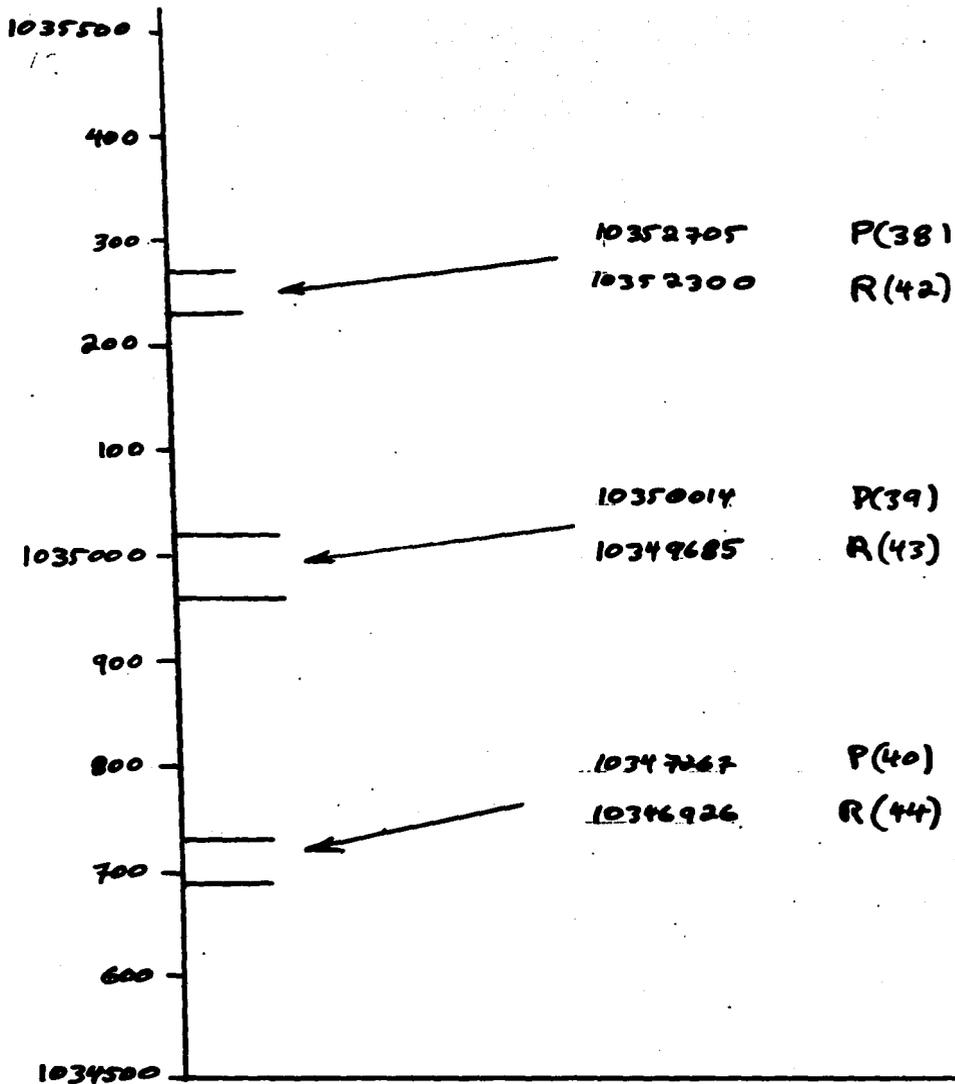
A partir de aqui los valores calculados se omiten

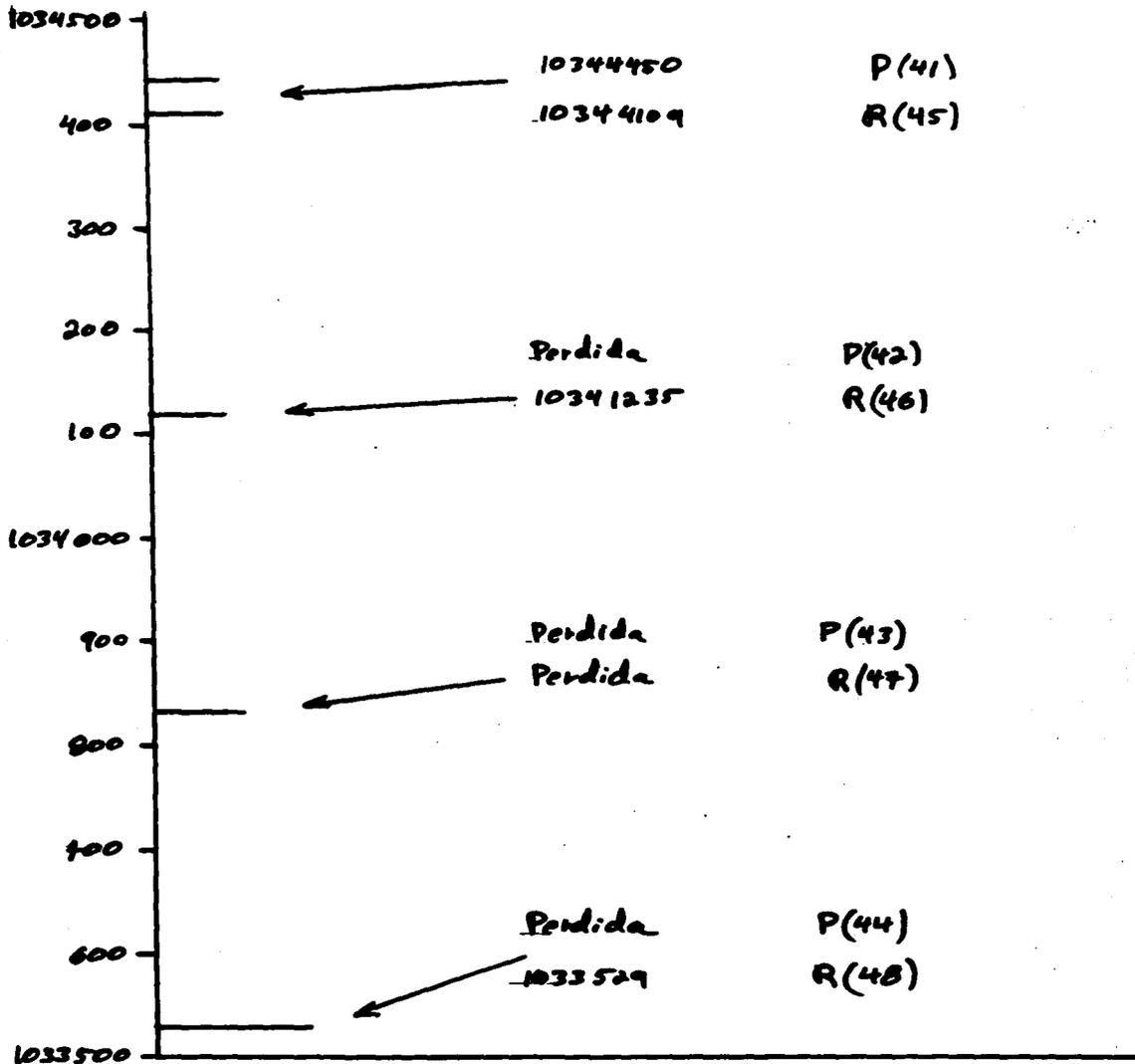


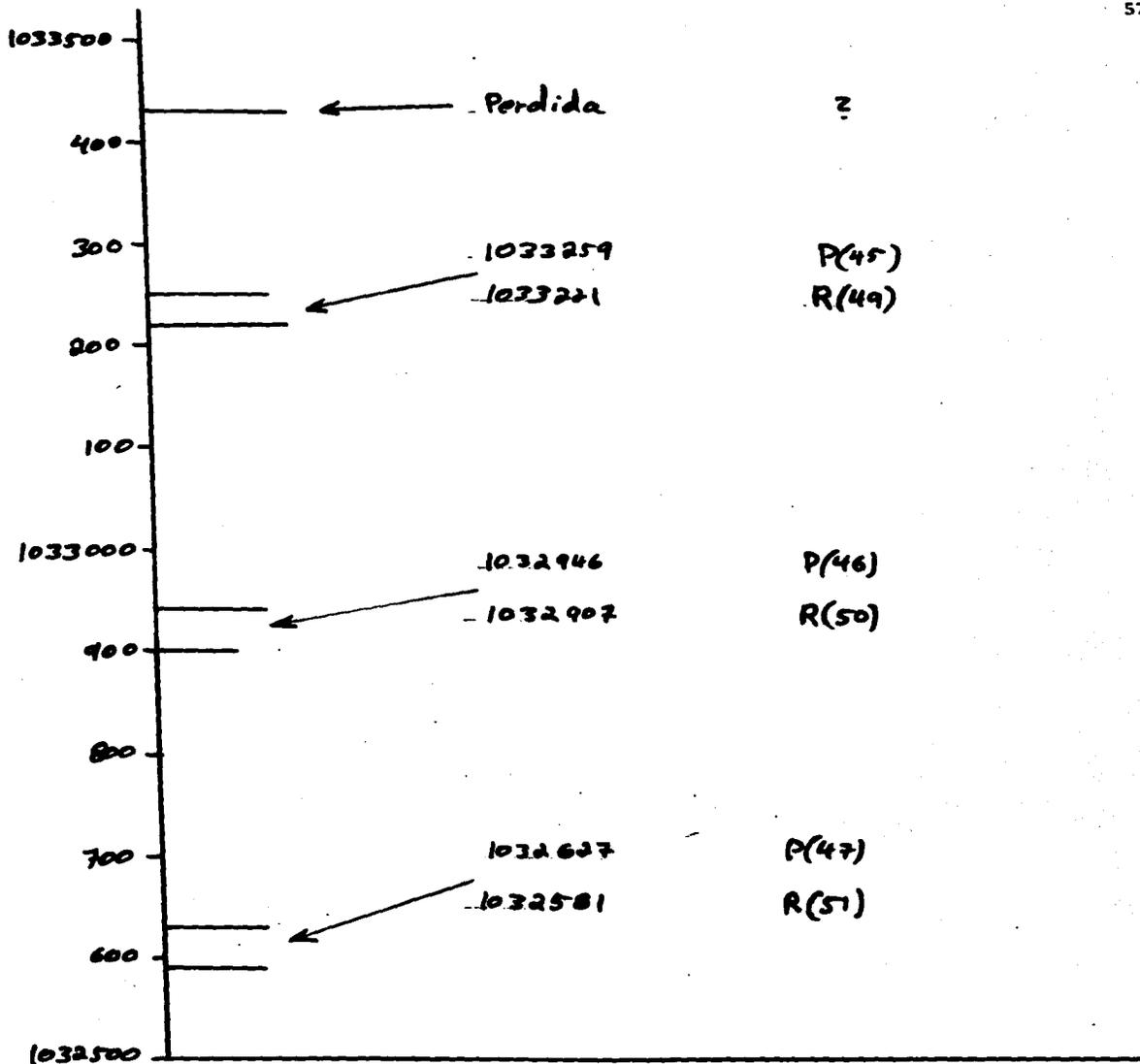


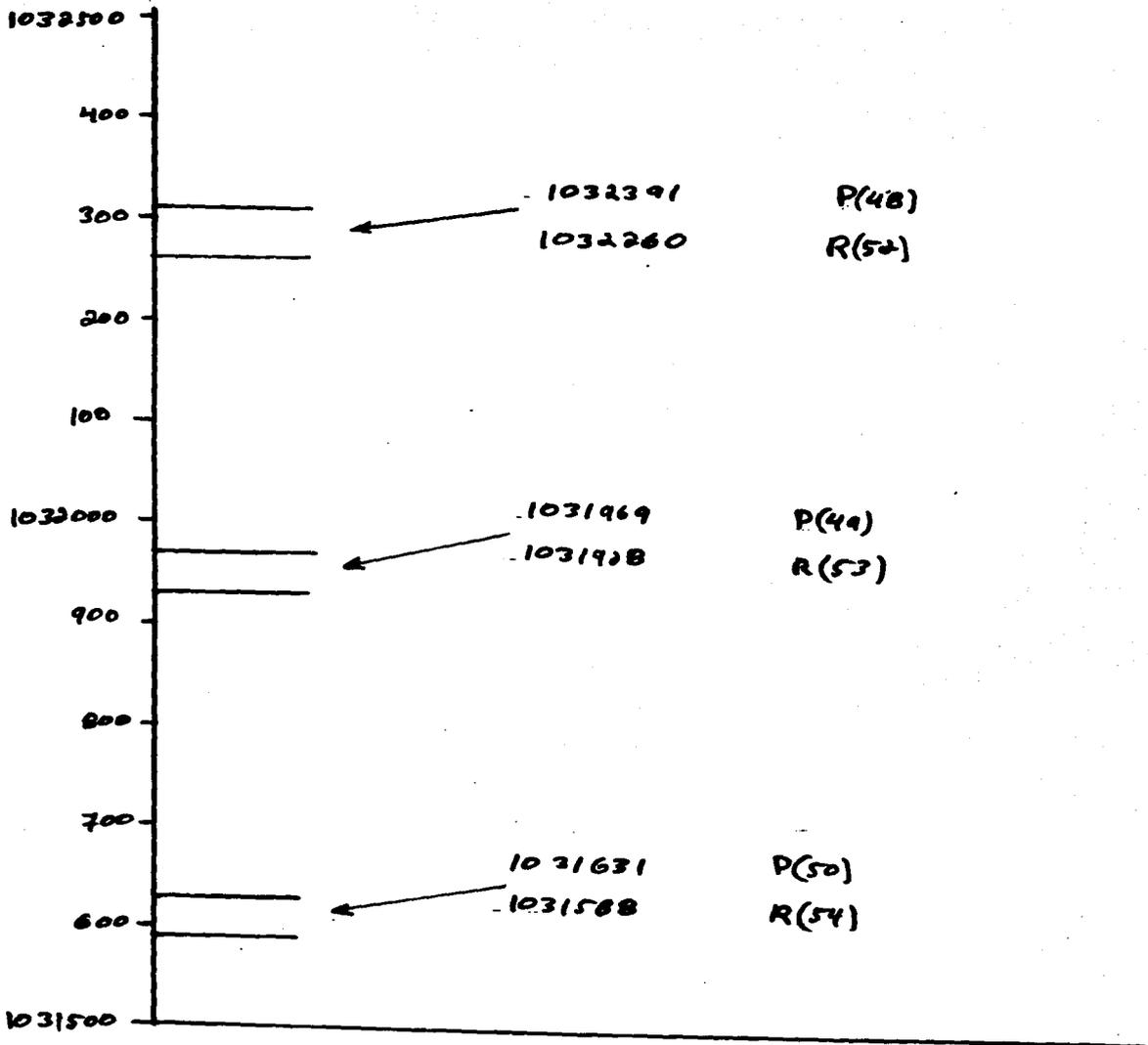


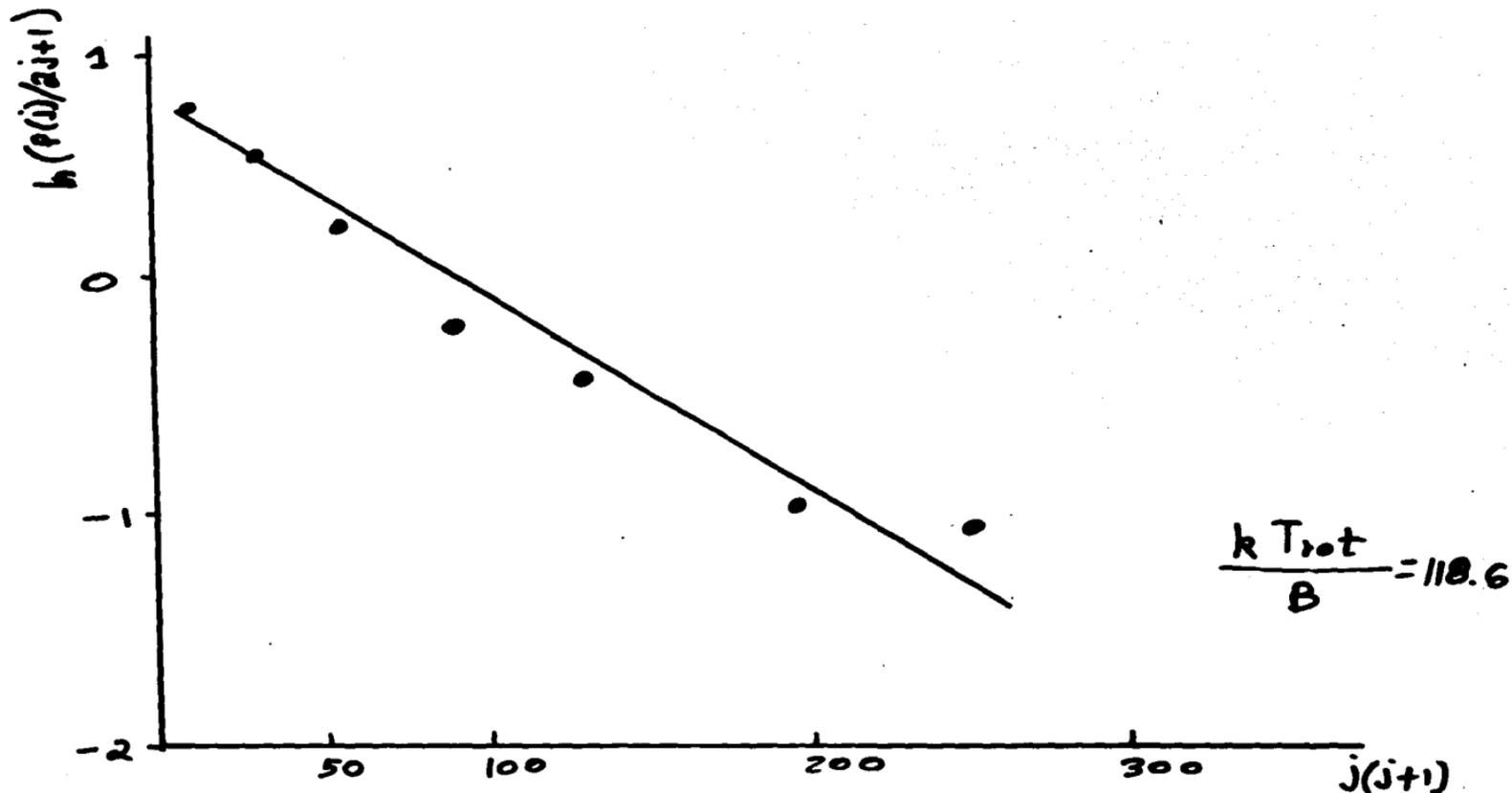












Graf. 2.1 Población de los niveles rotacionales. Determinación de la Temperatura.

CAPITULO III DISPOSITIVO EXPERIMENTAL

Para fines prácticos, el dispositivo experimental se puede dividir en 6 partes.

- 1) Cámara de colisiones y sistemas de bombeo.
- 2) Fuentes de expansión supersónica de Na y Ar.
- 3) Láser analizador y Láser bomba.
- 4) Sistema de recolección óptica.
- 5) Interferómetro.
- 6) Sistema CAMAC de adquisición de datos.

La descripción que se hace a continuación de estas partes no será muy detallada, pues una descripción completa se puede encontrar en el trabajo de Serri⁽¹⁹⁾.

3.1) CAMARA DE COLISIONES Y SISTEMAS DE BOMBEO.

La cámara de colisiones es un cilindro de aluminio de un diámetro de 82 cm y altura de 46 cm. Esta cámara soporta las fuentes de partículas: las bombas de difusión; el sistema de recolección óptica y las ventanas para la entrada de los láseres.

En la fig. 3.1 se muestra una vista superior de la cámara y en la fig. 3.2 una vista lateral.

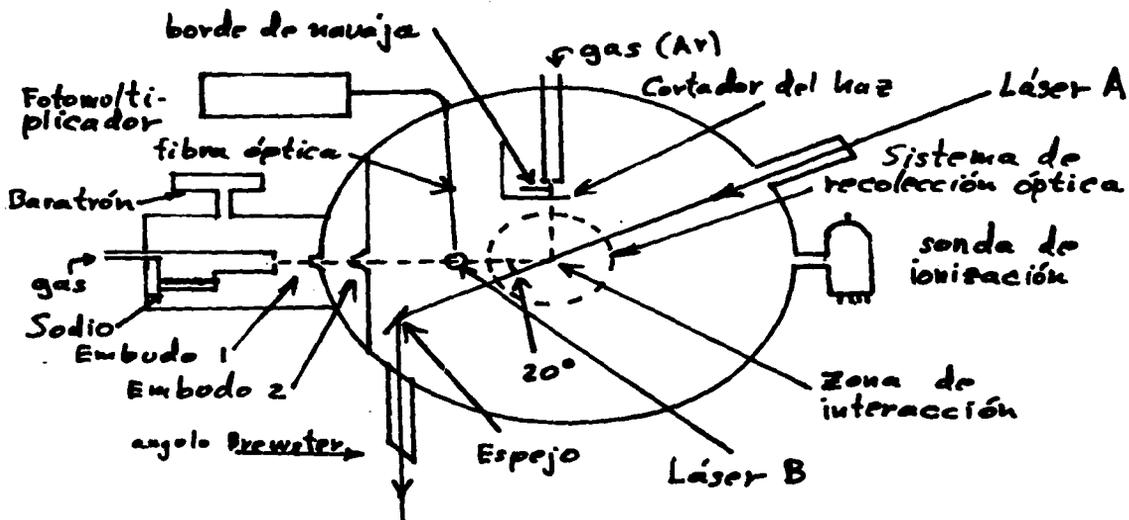


Fig. 3.1 Cámara de Colisiones (planta)

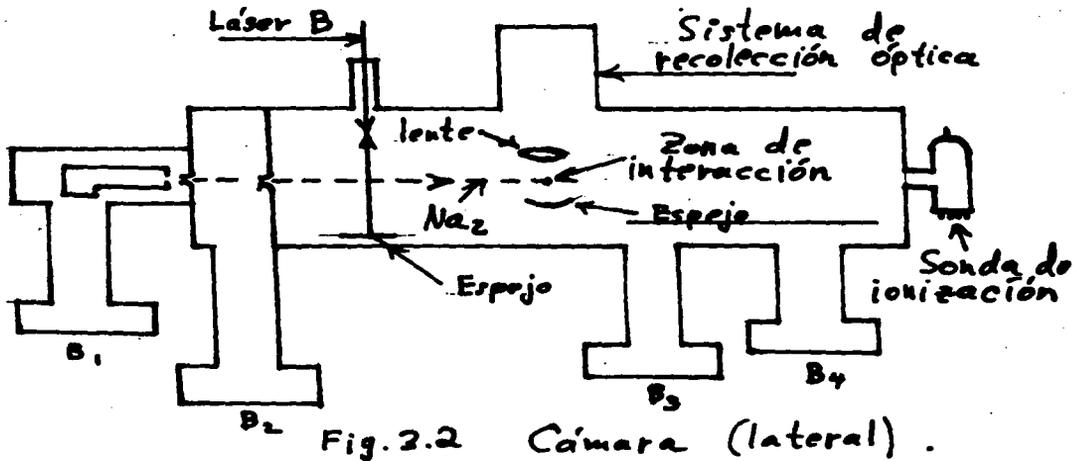


Fig. 3.2 Cámara (lateral).

En la fig. 3.1 se puede observar que después del horno hay dos embudos. Estos definen tres zonas en las que se realizó bombeo diferencial.

La primera zona, desde el horno hasta el embudo 1 se bombea con B_1 (fig. 3.2). B_1 es una bomba de difusión de 4" (Stokes ring jet booster pump), con una velocidad de bombeo de 200 l/seg.

Aunque esta velocidad es pequeña, la bomba puede trabajar a altas presiones (50×10^{-3} Torr), lo que le permite manejar una gran cantidad de gas. La bomba mecánica de apoyo fué una Welch de 25 l/seg. La zona entre los embudos 1 y 2 se bombeó con una bomba de difusión Varian (B_2) de 6" de 1,500 l/seg. Finalmente la zona de interacción (o sea la cámara), se bombeó con dos bombas de difusión Varian (B_3 y B_4 Fig. 3.2); una de 10" a 4200 l/seg. y otra de 4" a 1200 l/seg.

Sin carga de gas, (sin utilizar la bomba B_1), el sistema quedaba a un vacío de 10^{-6} Torr. Con carga de gas y todas las bombas funcionando, el vacío era de 2×10^{-5} Torr.

Un baratrón en la zona del horno y una sonda de ionización en la cámara, permitieron medir los vacíos obtenidos.

Todo el sistema de bombeo mecánico estaba conectado en paralelo a una línea de vacío con una capacidad total de 32 l/seg. Los sellos utilizados en todos los casos fueron de neopreno.

3.2) FUENTES DE EXPANSION SUPERSONICA DE Na_2 y Ar.

En el cap. II, se explicó al principio de funcionamiento de este tipo de fuente molecular (o atómica). La fig. 3.3 muestra un esquema del horno y fuente para el Na_2 .

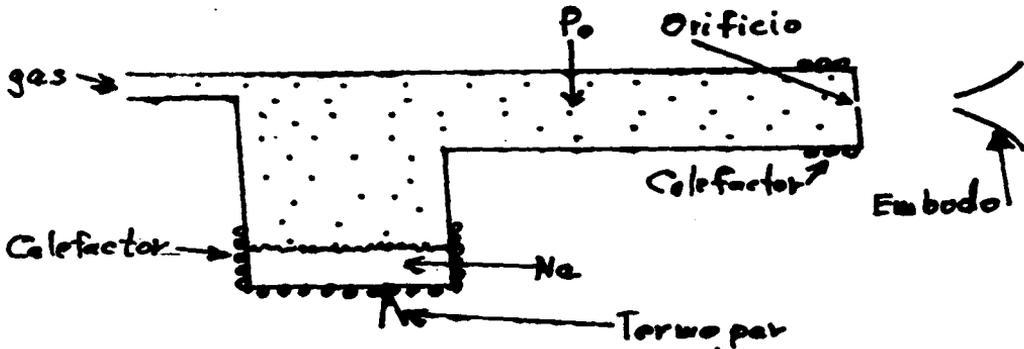


Fig. 3.3 Fuente de sodio molecular.

Como se muestra en la For. 2.5, la velocidad final depende de la masa atómica del gas expandido. Se pueden obtener velocidades intermedias con mezclas de diferentes gases, (He-Ne en nuestro caso). El flujo de gas que sale de la fuente depende la presión P_0 (Fig. 3.3). Por otra parte la cantidad de sodio que sale de la fuente depende de la presión de

vapor de éste, a la temperatura del horno. De la relación entre P_0 la presión de vapor de Na_2 y el flujo gaseoso total, se puede conocer la intensidad de sodio en el haz.

Como puede notarse en la Fig. 3.3, además del calefactor del horno, está colocado un termopar con el fin de medir la temperatura del Sodio. La presión parcial de Sodio (a $T = 600^\circ\text{C}$), así como la razón de Sodio atómico a molecular se obtuvo del trabajo de Honig⁽²⁰⁾. El orificio (Fig. 3.3) de salida fué de un diámetro de 70 micras y se colocó otro calefactor para mantenerlo a una temperatura ligeramente mas alta con el propósito de impedir que se tape por alguna condensación.

Para medir la cantidad de gas manejado en la expansión se construyó un medidor de flujo que se muestra en la Fig. 3.4.

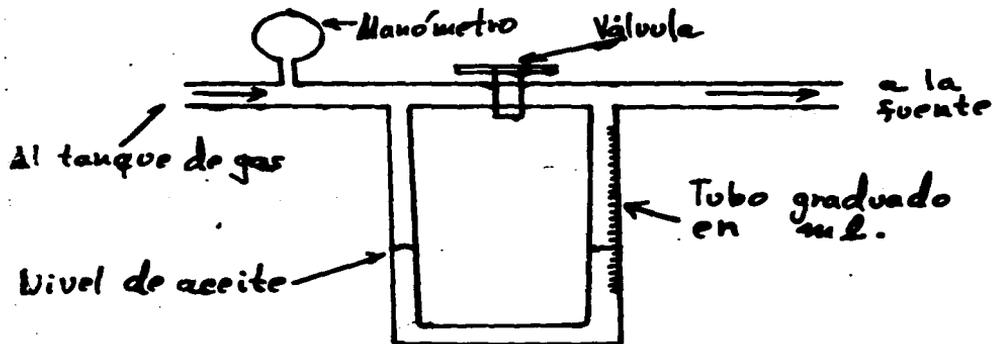


Fig. 3.4 Dispositivo para medir el flujo gaseoso.

A pesar de su sencillez, este dispositivo es bastante exacto. Normalmente la válvula permanece abierta y por tanto en las dos ramas del nivel de aceite es el mismo (Aceite de bomba de difusión). Al cerrar la válvula la trayectoria del gas cambia, el aceite empieza a ascender en el tubo graduado. Una medida de tiempo, permite calcular el volumen por unidad de tiempo, y puesto que la presión es conocida, se tiene toda la información necesaria.

Las presiones típicas fueron de ~ 5 atmósferas.

Vale la pena hacer notar que este flujímetro jugó un papel importante, pues una variación en el diámetro del orificio de 70 micras, modifica la intensidad del haz. De esta forma el flujímetro permitía conocer las condiciones del orificio de salida.

El embudo (Skimmer), que se muestra frente al orificio de salida define la primer zona de bombeo, tiene una forma aerodinámica con el fin de perturbar mínimamente la expansión, además es de paredes muy delgadas con el mismo propósito.

La fuente de Argón es esencialmente idéntica, excepto que no tiene el horno y tampoco embudos. Estos no eran necesarios puesto que la presión de gas fué menor de 0.5 Atm., y el orificio de salida de 50 micras. Sin embargo en la Fig. 3.1 puede notarse un borde de navaja con el fin de crear una "sombra" de argón, para que este no interacciones con el sodio antes de la zona de interacción.

Además un cortador de haz permite interrumpir el flujo de argón.

3.3) LASER ANALIZADOR Y LASER BOMBA

Con ese nombre distinguiremos a los láseres que tendrían la siguiente función: el analizador excita la molécula de sodio después de la colisión y la bomba lo hace antes. En el cap. IV se dará la explicación para este procedimiento.

Estos láseres son del tipo entonable y continuos con un medio activo que consiste de un tinte orgánico. El tinte se bombea ópticamente con un láser de Argón⁺, requiriéndose unos 4 Watts de potencia luminosa del Argón⁺ para cada uno de los de tinte.

El láser de Ar⁺ utilizado fue un Spectra Physics Modelo 171.

El haz de este láser se dividió en dos para bombear a los láseres entonables - continuos-

La principal diferencia entre un láser entonable y los que no lo son, (aunque en alguna medida todos son entonables), es el medio activo.

Los tintes orgánicos tienen bandas de absorción muy intensas, (de ahí su fuerte coloración); las cuales ensanchadas por efecto Doppler, hacen un efecto de traslape,

lográndose de esta manera el efecto láser en una amplia región del espectro.

Para seleccionar una longitud de onda, se utilizan elementos selectivos dentro de la cavidad del láser. El más común y que proporciona un ancho de línea muy angosto es el patrón Fabry-Perot.

De los dos láseres de tinte, uno de ellos fue un láser de anillo, (Ring laser).

Este tiene la peculiaridad de tener en vez de cavidad con dos espejos, a un conjunto de cuatro espejos. De esta manera la luz circula en una dirección formando un anillo de luz.

Como no hay luz propagándose en la dirección contraria, no hay formación de onda estacionaria. (Para lograrlo se utiliza un dispositivo unidireccional basado en el efecto Faraday).

Este tipo de láser, al no tener nodos y antinodos genera el doble de potencia luminosa.

El láser de anillo fué un Spectra Physics 580 y el otro un Coherent Radiation 599.

Para mantener la estabilidad de estos láseres, se "amarró" uno de ellos a un patrón Fabry-Perot de un intervalo espectral libre de 1.5 G Hertz y una fineza =300.

Finalmente los dos haces se enviaron a sus respectivas ventanas en la cámara de colisiones de la fig. 3.1. El láser analizador entra por una ventana, pasa por la zona de interacción y finalmente se extrae de la cámara por medio de una ventana a ángulo de Brewster.

El otro láser (fig. 3.2), entra por la parte superior de la cámara pasa a través del haz de sodio y es reflejado por un espejo para que salga por donde entró.

3.4) SISTEMA DE RECOLECCION OPTICA

El instrumento esencial de este sistema es un tubo fotomultiplicador enfriado a -20° C; RCA 31034. La razón de enfriar el elemento sensible, es la de reducir al mínimo el número de cuentas oscuras (cuentas espurias cuando no hay luz). Para ese fotomultiplicador se obtuvieron 50 cuentas /seg. a -20° C, mientras que a temperatura ambiente hay 2×10^5 cuentas /seg. Un espejo y una lente cerca de la zona de interacción, envían la luz hacia el elemento sensible del fotomultiplicador.

La señal de salida del fotomultiplicador se puede manejar en forma analógica o digital. El espectro que se muestra en el cap. II, se registró en forma analógica, o sea, midiendo la corriente total a la salida del fotomultiplicador.

En cambio, para el caso de la fluorescencia recolectada en la colisión que se describe en el cap. IV, se usó la técnica digital, en la que un fotón registrado por el fotomultiplicador se convierte en un pulso, que pasa a incrementar la cuenta de un escalador. La fibra óptica, (Fig. 3.1), envía la fluorescencia producida por el láser B, a otro fotomultiplicador.

3.5) INTERFEROMETRO

Este dispositivo se describió en el capítulo anterior. Aquí se agregará únicamente que su función es la de poder localizar las líneas moleculares. Una celda a 80° C, conteniendo sodio, permitía verificar constantemente al sistema: o sea el interferómetro ~~y~~ láser de tinte. Para ello se entonaba el láser a una de la líneas D del sodio atómico, y de esta forma se verificó que el sistema funcionara correctamente.

3.6) SISTEMA CAMAC DE ADQUISICION DE DATOS

(6)

CAMAC son las iniciales de: Computer-Automated Measurement and Control. CAMAC es un conjunto de normas internacionales para la construcción compatible de cualquier clase de instrumentación digital y analógica, que requiera de transmisión de información digital y comunicación en general entre diferentes módulos. Corresponde al acuerdo ANSI/IEEE Std 583-1982 (norteamericano) y al europeo ESONE EUR 4100.

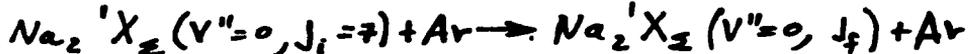
CAMAC Se puede adaptar a prácticamente cualquier computadora, además de que las características de instrumento CAMAC no están sometidas al arbitrio del fabricante.

En el experimento descrito en este trabajo, los módulos CAMAC, manejaron la información que salía del experimento y estuvieron a cargo del control de diferentes dispositivos asociados a los haces moleculares.

En el capítulo IV se detalla ese tema.

Una PDP //20 controló el sistema CAMAC. Los datos se acumularon en una cinta magnética de una PDP //34.

CAP. IV MEDIDA DE LA SECCION TRANSVERSAL EN LA COLISION:



4.1 Método para la medida de la sección relativa.

El propósito de los dispositivos experimentales que se describieron en los capítulos anteriores, es medir las secciones del proceso anotado en el título de este capítulo.

Esencialmente se trata de estudiar la probabilidad de que la molécula de sodio cambie su energía rotacional de un momento angular inicial descrito por el número cuántico J_i a un número cuántico final J_f . Este cambio de número cuántico se debe a la colisión con un átomo de argón que se considerará el blanco.

Los haces de Na_2 y Ar cruzados a 90° , son producidos por la técnica de expansión supersónica, y se encuentran en la zona de interacción, al centro de la cámara de colisiones.

También en esa zona de interacción, a un ángulo de 20° respecto al Na_2 pasa el haz del láser analizador. (Fig. 4.1).

Antes de la zona de interacción, a un ángulo de 86° con respecto al haz de sodio, interacciona el láser bomba.

Las velocidades en el sistema del laboratorio del Na_2 y el Ar son respectivamente, (medidas con la técnica DVCD):

1.55×10^5 cm/seg y 5.6×10^4 cm/seg. Con estos valores se obtiene una energía cinética en el centro de masa: K equivalente a 0.3 eV.

$$K = \frac{1}{2} \frac{M_{Na_2} M_{Ar}}{M_{Na_2} + M_{Ar}} v_{rel}^2$$

Puesto que el láser bomba cruza prácticamente a 90° al haz de sodio, y la potencia es suficiente para saturar; el nivel bombeado queda despoblado. (cap. I). (excepto por un factor que se explicará posteriormente).

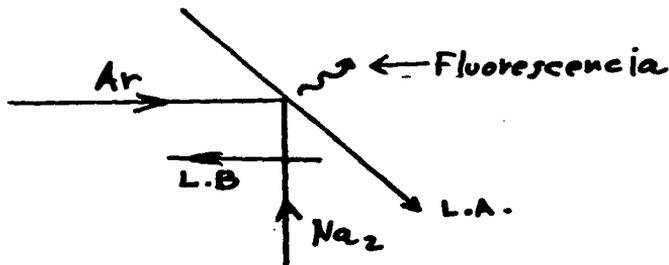


Fig. 4.1 Disposición del haz molecular Na_2 ; haz de Argón; láser analizador (L.A) y láser bomba (L.B).

Es conveniente aclarar que el cambio en la energía rotacional del Na_2 , que ocurre como consecuencia de la colisión con el Ar, es un cambio dentro del mismo estado electrónico y vibracional de la molécula. O sea después de la colisión $Na_2 + Ar$, la molécula de sodio cambia su número cuántico rota-

cional de J_i a J_f del mismo estado electrónico. Puesto que el láser analizador excita electrónicamente al nivel J_f , la fluorescencia es indicativa de la población del nivel J_f (cap. I).

El láser analizador se entona a una transición electrónica que parte del nivel rotacional J_f . Simultáneamente, el láser bomba se entona a una transición electrónica que parte de otro nivel rotacional J_i . Si alternadamente el láser bomba se enciende y se apaga; los cambios en la fluorescencia inducida por el láser analizador, son esencialmente, debidos al número de transiciones rotacionales por colisión del nivel J_i al J_f . Este fué el procedimiento que se utilizó para el estudio de la transferencia de energía rotacional.

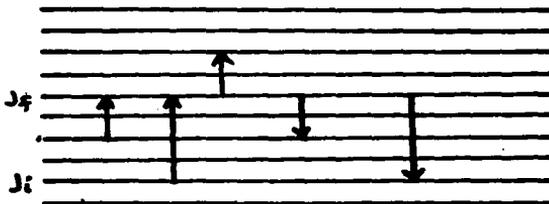


Fig. 4.2 Cambios en el número rotacional J , como consecuencia de una colisión.

En la fig. 4.2 se muestran las transiciones que pueden ocurrir en la colisión. (Aunque no simultáneamente, pues es to implicaría doble colisión).

Denotando por $S^{()}$, $()$ a la señal fluorescente inducida por el láser a; en donde el primer superíndice indica la presencia de blanco y el segundo la del láser bomba:

" 1 " si esta presente, " 0 " si no esta.

Según esa conversión $S^{1,0}$ significa que el cortador del haz de argón (cap. III), permite el paso del argón y que el láser bomba esta apagado.

Por inspección de la Fig. 4.2 se concluye que:

$$S^{1,0} \propto N_{J_f} - \sum_{J_m} N_{J_f \rightarrow J_m} + \sum_{J_m} N_{J_m \rightarrow J_f} + N_{J_i \rightarrow J_f}. \quad (4.1)$$

En donde N_{J_f} es la población inicial de moléculas de sodio en el nivel rotacional J_f . $J_m \neq J_f$, $J_m \neq J_i$.

Los términos se refieren al número de moléculas que debido a la colisión, cambiaron su número rotacional.

De la misma manera:

$$S^{0,1} \propto N_{J_f} - \sum_{J_m} N_{J_f \rightarrow J_m} + \sum_{J_m} N_{J_m \rightarrow J_f} + F. \quad (4.2)$$

Aquí la transición $J_i \rightarrow J_f$ no ocurre por que el láser B despuebla el nivel J_i . El término F es la contribución a S de la fluorescencia inducida por el láser B y que inevitablemente es detectada por el fotomultiplicador.

$$\text{Restando: } S^{1,0} - S^{0,1} \propto N_{J_i \rightarrow J_f} - F, \quad (4.3)$$

$$\text{Tambien: } S^{0,1} \propto N_{J_f} + F, \quad S^{0,0} \propto N_{J_f}. \quad (4.4)$$

Entonces:

$$S^{0,1} - S^{0,0} \propto F.$$

Finalmente:

$$S^{1,0} - S^{1,1} + S^{0,1} - S^{0,0} \propto N_{J_i} \rightarrow j_f. \quad (4.5)$$

Esta última expresión es precisamente el número de transiciones del nivel. J_i al J_f .

Para la validez de la expresión 4.5 es necesario suponer que el láser bomba despuebla completamente el nivel inicial J_i .

Sin embargo se observó que en el mejor de los casos, sólo el 70% de la población inicial era bombeada.

Este número se midió entonando los dos láseres al mismo nivel rotacional; de esa forma la fluorescencia inducida por el láser analizador mide la población residual.

El hecho de que no se despueble el 100% del nivel inicial parece indicar que el láser B no satura la transición. Sin embargo, una observación en la estabilidad en frecuencia del láser bomba, mostró que aunque el ancho espectral es del orden de un M Hertz, el centro de la línea oscila unos 20 M Hertz. Esta oscilación tiene su origen en vibraciones mecánicas de la cavidad del láser.

Tomando en cuenta que este láser cruza al haz de sodio a un ángulo de casi 90°, se puede entender porque el láser bomba no despuebla todo el nivel. (En este caso el ancho Doppler es cercano a cero).

Según lo anterior, sería necesario introducir un factor de corrección en la expresión 4.5. Este factor no se introduce porque todas las secciones son relativas. (Es la razón

por la que se pusieron proporcionalidades).

Además, para corregir la sección por cambios en la irradiación del láser analizador, se usó como referencia la sección correspondiente a $\Delta J=2$. Esto se muestra en la siguiente expresión:

$$S_{\Delta J=2} \propto \sqrt{I_{\Delta J=2}} I_{\Delta J=2}^{1/2}, \quad S_{\Delta J} \propto \sqrt{I_{\Delta J}} I_{\Delta J}^{1/2} \quad (4.6)$$

En esta relación se incluye la saturación, según se describió en el cap. I.

La corrección por cambio en la intensidad del láser queda finalmente:

$$\frac{\sqrt{I_{\Delta J}}}{\sqrt{I_{\Delta J=2}}} = \frac{S_{\Delta J}}{S_{\Delta J=2}} \left(\frac{I_{\Delta J=2}}{I_{\Delta J}} \right)^{1/2} \quad (4.7)$$

Si desea obtener una distribución angular para un ΔJ específico, basta con hacer un barrido en frecuencia; según se discutió en el cap. I. (DACD).

Puesto que la colisión transfiere energía rotacional, es necesario considerar la inelasticidad de ésta.

El cambio en velocidad, por colisión inelástica, se puede calcular fácilmente utilizando la expresión⁽¹⁰⁾.

$$E = 0.155 (\text{cm}^{-1}) [J_f (J_f + 1) - J_i (J_i + 1)], \quad (4.8)$$

(con ΔJ par por la simetría molecular), que corresponde al cambio de energía rotacional por la transferencia $J_i \rightarrow J_f$ para la molécula de sodio. Por otra parte la fórmula 1.13, permite calcular el corrimiento en frecuencia para $\theta = 0^\circ$.

4.2 Obtención y manejo de los datos experimentales.

Como se mencionó en el cap. III, un sistema CAMAC controlado por una computadora, fué el método de adquisición y manejo de los datos.

La señal fluorescente $S^{()}$, $()$, manejada en forma digital, se almacenó en un par de escaladores. Estos dos escaladores funcionaban alternadamente, tomando uno la señal $S^{()}.1$ y el otro $S^{()}.0$. O sea que por un tiempo determinado funcionaba un escalador para la señal con el láser bomba $S^{()}.1$, y después el otro sin el láser $S^{()}.0$. Este relevo de un escalador al otro se hizo a una frecuencia de 800 Hz. La sincronía entre los escaladores y el láser bomba, se logró por medio de un disco cortador, que por medio de sus orificios cortaba el láser y producía la señal de compuerta para cambiar de escalador.

Cada 2,000 aperturas de la compuerta dadas por el disco cortador, los datos de los escaladores se pasaban a una cinta y se iniciaba una nueva cuenta.

Para esa nueva cuenta, un módulo CAMAC de salida analógica, cambiaba el cortador del argón a su nuevo valor y de nuevo se iniciaba la cuenta en los escaladores.

Según lo anterior, cada 3 segundos se obtienen 1000 valores para cada uno de los 4 estados de $S^{()}$, $()$.

Una vez transferidos estos a la cinta de la computadora, ésta cambia la frecuencia del láser analizador en 64 M Hertz,

con el fin de obtener la distribución angular. Cada 5 segundos se repite el procedimiento hasta obtener la distribución angular total.

Finalmente, de acuerdo con un programa escrito para ese propósito, la computadora muestra en una pantalla de almacenamiento la curva de la distribución angular.

4.3 Discusión de los resultados

En la Fig. 4.3 se muestran las distribuciones angulares, para los siguientes casos:

$$\begin{array}{cccc}
 \bullet \Delta J = 2 & + \Delta J = -4 & \circ \Delta J = 16 & \times \Delta J = 28 \\
 \triangle \Delta J = 40 & \square \Delta J = 48 & \nabla \Delta J = 80 &
 \end{array}$$

Como ya se dijo las secciones son relativas y referidas a la de $\Delta J = 2$ según la expresión 4.7. La continuación de las curvas a valores menores de 0° o mayores de 180° , es un efecto producido por la baja resolución angular en esos extremos. La mejor resolución se obtiene a 90° , en donde es de 4° (21). Las barras de error se calcularon tomando en cuenta la propagación de los errores debido a las diferencias de la expresión 4.5. Cada sección esta constituida por 40 puntos experimentales.

Schinke y McGuire (22), en un cálculo cuántico para la colisión He-Na₂ a 0.1 eV, encuentran un comportamiento que cualitativamente es idéntico al obtenido experimentalmente en esta tesis.

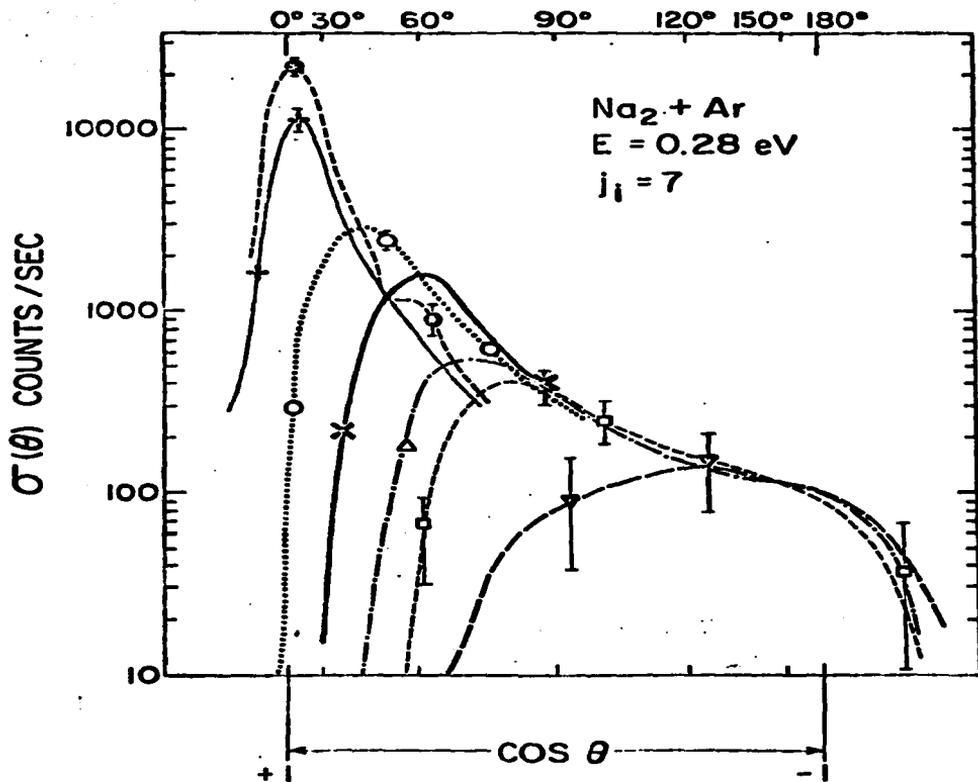


Fig. 4.3 Distribuciones Angulares

Se puede observar de la figura 4.3 las siguientes peculiaridades:

- a) El máximo en la sección $\nabla(\Theta)$ se mueve a ángulos mayores conforme se incrementa ΔJ .
- b) Los máximos en la sección se vuelven menos pronunciados para ΔJ grandes.
- c) Las secciones decaen por la derecha en una curva común. Todas estas características están presentes en los resultados obtenidos por Schinke.

Adicionalmente, Schinke encuentra que para ΔJ pequeñas la sección tiene una estructura oscilatoria.

Esta característica no se observa en los resultados experimentales.

Sin embargo, $\Delta J=2$ (Fig. 4.3) muestra una pequeña oscilación que podría ser parte de la estructura oscilatoria.

Es interesante hacer notar que Serri⁽¹⁹⁾, utilizando el modelo clásico de una colisión entre un elipsoide duro y una esfera, logra predecir las características a), b) y c); exceptuando por supuesto, la cuantización de los valores del momento angular.

A la característica de que se presente un máximo en la sección para cada valor de J , se le ha llamado "halo"⁽²³⁾ y también es previsto por el modelo de Serri.

CONCLUSIONES

En este trabajo se obtuvieron las distribuciones angulares en la colisión $\text{Na}_2 + \text{Ar}$, cuando hay transferencia de energía rotacional.

Se obtuvo también, un espectro de la molécula de sodio y se hizo una estimación de la temperatura del haz molecular proveniente de un chorro de expansión supersónica.

En general, se ha mostrado la utilidad del efecto Doppler para la caracterización de una colisión; pues se puede afirmar que siempre que sea posible inducir fluorescencia en un haz molecular o atómico, se puede obtener información del vector de velocidad.

La principal desventaja del método DACD, comparado con el de detectores móviles, es su baja resolución angular. Sin embargo, es importante hacer notar que para estados de vida media muy corta, el método DACD puede ser insustituible, pues el análisis se realiza en el momento mismo de la colisión.

Por supuesto, es de esperarse que las técnicas DACD y DVCD aumenten su campo de aplicación, conforme la tecnología de los láseres entonables vaya cubriendo zonas más amplias del espectro electromagnético.

Por otra parte, existe una gran actividad teórica en el estudio de transferencia de energía rotacional, (ver por ejemplo Corey y Alexander⁽²⁴⁾), lo cual a su vez genera la necesidad de perfeccionar este tipo de experimentos.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- (1) W.D. Phillips, J.A. Serri, D.J. Ely, D.E. Pritchard, K.R. Way and J.L. Kinsey. Angular Scattering Distributions by Doppler Spectroscopy: $Na(3P_{1/2}) + Ar \rightarrow Na(3P_{3/2}) + Ar$. Phys. Rev. Lett. 41, 937, (1978)
- (2) R.B. Leighton. Principles of Modern Physics. McGraw Hill (1959) pág. 14.
- (3) A. Yariv. Quantum Electronics. Wiley (1975).
- (4) W.A. Guillory. Introduction to Molecular Structure and Spectroscopy. Allyn and Bacon (1977), pág. 26.
- (5) H.A. Bethe, R. Jackiw. Intermediate Quantum Mechanics. Benjamin (1973) pág. 199
- (6) CAMAC Instruments and Interface Standards. IEEE Wiley-Interscience (1982)
- (7) G. Herzberg. Molecular Spectra and Molecular Structure. Vol. I. Spectra of diatomic Molecules. Van Nostrand Reinhold (1950)
- (8) H. Walter. Laser Spectroscopy. Springer Verlag (1976)
- (9) R.P. Feynman, F.L. Vernon and R.W. Hellwarth. Geometrical Representation of the Schroedinger Equation for Solving Mase Problems. Journal of Applied Physics 28, 49, (1957)
- (10) M.E. Kaminsky. Modulated Population Spectroscopy: Identification of Absortion Lines by Modulated Lower Level Population: Spectrum of Na₂. Tesis Doctoral. Universidad de Stanford. (1976).

- (11) W.J. Stevens. Theoretical Transition Dipole Moments and Lifetime for the $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ System of Na_2 . The Journal of Chemical Physics. 66, 1477, (1977)
- (12) Letockov, Chebotayev. Nonlinear Laser Spectroscopy. Springer Verlag (1976)
- (13) J.P. Toennies, K. Winhelmann. Theoretical Studies of Highly Expanded Free Jets: Influence of Quantum effects and a realistic Intermolecular Potential. J.Chem. Phys. 66, 3965 (1976)
- (14) C.E. Klots. Rotational Relaxation in Sonic Nozzle Expansions' J. Chem. Phys. 72, 192, (1979)
- (15) L. Marton. Methods of Experimental Physics, Vol 7, Part A Academic Press (1968).
- (16) J.L. Dunham. Phys. Rev. 41, 721 (1932)
- (17) P. Kusch, M.M. Hessel. Perturbation in the State of J. Chem. Phys. 63, 4087 (1975)
- (18) F.V. Kowalsky, R.T. Hawkins, L. Schawlow. Digital Wavemeter for cw Lasers. J. Opt. Soc. Am. 66, No. 9, 965 (1976)
- (19) John A. Serri. Angular Distribution for Rotational Energy Transfer: $\text{Na}_2 + \text{Ar}$. Tesis Doctoral. Instituto Tecnológico de Massachusetts (1980)
- (20) R.E. Hcnig, D.A. Kramer. RCA Review 30, 285, (1969)
- (21) J.A. Serri, J.L. Kinsey, D.E. Pritchard. Measuring Differential Cross Section Using the Doppler Shift. J. Chem. Phys. 75(2), 663 (1981)
- (22) R. Schinke, P. McGuire. Rotational Rainbow Oscillation in Ne- Na_2 Collisions: Comparison Between Coupled States and Infinite-Order Sudden Approximation. J. Chem. Phys. 71(11), 4201 (1979)

- (23) J.A. Serri, A. Morales, N. Moskowitz, D.E. Pritchard, C.H. Becker, J.L. Kinsey. Observation of Halos in Rotationally Inelastic Scattering of Na_2 From Ar. J. Chem. Phys. 72(11), 6304(1980)
- (24) G.C. Corey, M.H. Alexander. Rotationally Inelastic Collisions Between a Molecule in a $^2\Sigma$ Electronic State and a 2S Atom: Sudden Factorization, Scaling, and Symmetry Relations. J. Chem. Phys. 85(4), 1859(1986).

* * *